

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL

INVARIANTS DE GRAPHS LIÉS AUX GAZ IMPARFAITS

THÈSE

PRÉSENTÉE

COMME EXIGENCE PARTIELLE

DU DOCTORAT EN MATHÉMATIQUES

PAR

AMEL KAUCHE

JUIN 2009

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL
Service des bibliothèques

Avertissement

La diffusion de cette thèse se fait dans le respect des droits de son auteur, qui a signé le formulaire *Autorisation de reproduire et de diffuser un travail de recherche de cycles supérieurs* (SDU-522 – Rév.01-2006). Cette autorisation stipule que «conformément à l'article 11 du Règlement no 8 des études de cycles supérieurs, [l'auteur] concède à l'Université du Québec à Montréal une licence non exclusive d'utilisation et de publication de la totalité ou d'une partie importante de [son] travail de recherche pour des fins pédagogiques et non commerciales. Plus précisément, [l'auteur] autorise l'Université du Québec à Montréal à reproduire, diffuser, prêter, distribuer ou vendre des copies de [son] travail de recherche à des fins non commerciales sur quelque support que ce soit, y compris l'Internet. Cette licence et cette autorisation n'entraînent pas une renonciation de [la] part [de l'auteur] à [ses] droits moraux ni à [ses] droits de propriété intellectuelle. Sauf entente contraire, [l'auteur] conserve la liberté de diffuser et de commercialiser ou non ce travail dont [il] possède un exemplaire.»

REMERCIEMENTS

Je désire d'abord remercier mes directeurs de thèse Christophe Reutenauer et Cédric Lamathe pour leur bienveillance et leur enthousiasme mathématique. Remerciements spéciaux à Cédric pour sa dynamique codirection.

Je remercie aussi Gilbert Labelle pour avoir continué de me diriger officieusement, me soutenir et m'encourager suite au décès de mon premier directeur de thèse, Pierre Leroux.

Merci, Pierre, pour avoir su me transmettre la passion de la combinatoire et ses liens avec la mécanique statistique.

Merci à tous les membres du LaCIM et du département de mathématiques, aussi bien les professeurs que les secrétaires ; avec une mention spéciale à notre technicien du LaCIM, Jérôme Tremblay, pour ses disponibilités continuelles à mon égard, à Lise Tourigny qui a été pour moi, en quelque sorte, une deuxième mère ainsi qu'à Manon Gauthier.

Merci à mes parents, mon mari Salim et notre fils Rassim sans lesquels cette thèse n'aurait jamais vu le jour.

Je souhaite remercier les membres du jury, Gilbert Labelle, professeur émérite à l'UQAM, Louise Laforest, professeure au département d'informatique, Cédric Lamathe, professeur associé au département de mathématiques, Christophe Reutenauer, professeur titulaire de la chaire de recherche "algèbre, combinatoire et informatique mathématique" du département de mathématiques de l'UQAM et le professeur Xavier Viennot, directeur de recherche CNRS au LaBRI, université Bordeaux I, France, pour avoir accepté d'examiner la présente thèse.

Pour terminer, un grand merci à l'ISM, au LaCIM, à la faculté des sciences de l'UQAM et au fond FARE pour leur soutien financier durant ces trois dernières années.

TABLE DES MATIÈRES

LISTE DES TABLEAUX	ix
LISTE DES FIGURES	xi
RÉSUMÉ	xv
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I	
PRINCIPES DE MÉCANIQUE STATISTIQUE	7
1.1 Notions préliminaires sur la théorie des graphes	7
1.2 Survol de la théorie de Mayer	10
1.2.1 Un peu de mécanique statistique	10
1.2.2 L'approche de Mayer	11
1.2.3 La limite thermodynamique $w_M(c)$	14
1.2.4 Multiplicativité de $w_M(c)$ sur les blocs	16
CHAPITRE II	
POIDS DE REE-HOOVER VERSUS POIDS DE MAYER	19
2.1 Le développement du viriel et le développement de Ree-Hoover	20
2.1.1 Le développement du viriel	20
2.1.2 Poids de Ree-Hoover et et poids de Mayer	21
2.2 Relations entre le poids de Mayer w_M et le poids de Ree-Hoover w_{RH}	22
2.3 Le star content et ses propriétés	24
2.3.1 Formule explicite du star content	24
2.3.2 Relations de récurrence pour le star content	26
CHAPITRE III	
GAZ À NOYAUX DURS ET À POSITIONS CONTINUES EN UNE DIMENSION	33
3.1 Gaz à noyaux durs en une dimension	34
3.1.1 Résultats généraux et spéciaux	35
3.2 Pourquoi certains graphes ont le poids de Ree-Hoover égal à 0	37

3.2.1	Conditions assurant la nullité du poids de Ree-Hoover	40
3.3	Le polynôme d'Ehrhart	40
3.4	La méthode des homomorphismes de graphes	45
3.5	Méthode des homomorphismes de graphes adaptée aux poids de Ree-Hoover	52
3.6	La méthode de Monte-Carlo	54
CHAPITRE IV		
QUELQUES FORMULES EXPLICITES POUR LES POIDS DE MAYER ET DE REE-HOOVER DE FAMILLES INFINIES DE GRAPHES		
4.1	Poids de Ree-Hoover de certaines familles infinies de graphes	67
4.1.1	Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus S_k$	68
4.1.2	Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus (S_j - S_k)$	70
4.1.3	Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus (C_4 \cdot S_k)$	73
4.1.4	Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus P_k$	77
4.2	Poids de Mayer de certaines familles infinies de graphes	78
4.2.1	Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus S_k$	78
4.2.2	Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus S_j - S_k$	79
4.2.3	Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus C_4$	79
4.2.4	Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus (C_4 \cdot S_k)$	80
4.2.5	Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus P_k$	80
CHAPITRE V		
GRAPHES BIPARTIS COMPLETS, POIDS DE MAYER ET DE REE-HOOVER VERSUS INVARIANTS CLASSIQUES DE GRAPHES		
5.1	Graphes bipartis complets $K_{m,n}$ et les fonctions Bêta incomplètes	84
5.1.1	Calcul de $w_M(K_{m,n})$ par évaluation de l'intégrale	87
5.1.2	Calcul de $w_M(K_{m,n})$ en utilisant des arrangements de points noirs et blancs	90
5.2	Le poids de Mayer et de Ree-Hoover versus quelques invariants de graphes	97
5.2.1	La relation entre le modèle gaussien et la complexité d'un graphe	97
5.2.2	Poids w_M et w_{RH} versus invariants classiques pour les particules dures	98
CHAPITRE VI		
POIDS DE MAYER ET TRANSFORMÉES DE FOURIER		
6.1	Changement de variables via une arborescence couvrante	104
6.2	Reformulation du poids de Mayer à l'aide des transformées de Fourier	106

6.3	Illustration de la méthode pour des graphes particuliers	110
6.3.1	Exemples spécifiques	110
6.3.2	Particules dures (“hard spheres”) en dimension d	113
6.3.3	L’asymptotique du poids des cycles de particules dures en dimension d	119
6.4	Algorithme de calcul pour les particules dures en dimension $d = 1$	121
6.4.1	Poids de Mayer dans le cas des particules dures en dimension $d = 1$ via les transformées de Fourier	121
6.4.2	Outils de calcul pour les intégrales itérées	123
	CONCLUSION	135
	APPENDICE A	
	GRAPHES 2-CONNEXES DE TAILLE ≤ 7	137
	APPENDICE B	
	PROCÉDURES MAPLE UTILISÉES	185
B.1	Polynôme d’Ehrhart	185
B.1.1	Exemple d’utilisation	188
B.2	Polynôme d’Ehrhart dans le cas de Ree-Hoover	189
B.2.1	Exemple d’utilisation	193
B.3	Méthode de Monte-Carlo	195
B.3.1	Exemple de manipulation des arbres	201
B.3.2	Exemple de calcul de volume	202
B.4	Calcul du star content	203
B.4.1	Exemple de calcul du star content	206
B.5	Recherche montrant que les deux poids ne sont pas fonctions de certains paramètres	206
B.5.1	Procédure Maple pour certains paramètres	206
B.5.2	Exemples	215
B.6	Implémentation en Maple de la méthode de Fourier	216
B.6.1	Calcul de la différence divisée pour des points distinctes	217
B.6.2	Calcul de la différence divisée pour des points répétés	217
B.6.3	Réduction d’un terme en un autre qui utilise seulement $\exp(i\nu t)$ où $\nu \geq 0$	218
B.6.4	Réduction de l’intégrand en utilisant seulement $\exp(i\nu t)$ où $\nu \geq 0$	218
B.6.5	Calcul de l’intégrale de T/P (lemme 8)	219

B.6.6	Calcul de l'ensemble des descendants d'un sommet j dans l'arborescence a	219
B.6.7	Calcul de l'ensemble des sommets de la sous-arborescence induite a_ν	220
B.6.8	Calcul de la différence entre les variables entrantes et sortantes	220
B.6.9	La transformée de Fourier de $\chi(x \in [-1, 1])$	221
B.6.10	Calcul de l'intégrand pour le poids de Mayer de c	221
B.6.11	Représentation des <code>sum_diff</code> comme des multi-ensembles	221
B.6.12	Calcul du poids de Mayer	222
B.6.13	Calcul du poids de Mayer des échelles	222
RÉFÉRENCES		225

LISTE DES TABLEAUX

3.1	Cardinalité de $(k \cdot \mathcal{P}(c) \cap \mathbb{Z}^d)$, $0 \leq k \leq d$	42
3.2	Cardinalité de $(k \cdot \mathcal{P}(c) \cap \mathbb{Z}^2)$, $k = 0, 1, 2$	44
3.3	Valeur estimée de w_{RH} des graphes 2-connexes de taille au plus 6 pour les dimensions 2 et 3 par la méthode de Monte-Carlo	65
5.1	Graphes bipartis complets de taille ≤ 8	86
6.1	$w_M(C_n)$, $n = 2, 3, \dots, 10$ et $d = 1, 3, 5$	118
6.2	$w_M(C_n)$, $n = 2, 3, \dots, 10$ et $d = 1, 2, \dots, 6$	118
6.3	$w_M(\text{Roue}[k])$, $k = 3, 4, \dots, 24$	131
6.4	$w_M(\text{Échelle}[k])$, $k = 2, 3, \dots, 20$	134

LISTE DES FIGURES

1.1 Un graphe simple et ses composantes connexes	8
1.2 Un graphe 2-connexe	9
1.3 Un graphe connexe avec ses blocs b_1, b_2, b_3, b_4 et ses points d'articulation 3, 6	9
1.4 Un graphe biparti complet	10
1.5 Fonctions φ et f	11
2.1 Un graphe 2- connexe G ainsi que les composantes connexes de $G \setminus b \setminus a$	27
3.1 Particules dures sur un segment de droite de la forme $[-\frac{V}{2}, \frac{V}{2}]$	34
3.2 $\widetilde{C_7} \subseteq \widetilde{K_7} \setminus C_7$	38
3.3 $\widetilde{C_8} \subseteq \widetilde{K_8} \setminus C_8$	39
3.4 Le graphe complet $c = K_3$ et son polytope associé $\mathcal{P}(c)$	41
3.5 Les trois dilatés, $0 \cdot \mathcal{P}(c)$, $1 \cdot \mathcal{P}(c)$, $2 \cdot \mathcal{P}(c)$, du polytope $\mathcal{P}(c)$	43
3.6 Représentation fractionnaire du nombre x_i	45
3.7 $ x_i - x_j < 1$	46
3.8 Représentation fractionnaire des nombres réels	47
3.9 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}(C_5)$	48
3.10 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope d'un graphe c	48

3.11	La décomposition du polytope $\mathcal{P}(K_3)$	50
3.12	Configurations associées au graphe K_3	51
3.13	$ x_i - x_j > 1$	53
4.1	Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus e)$	68
4.2	Le graphe S_3	69
4.3	Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus S_3)$	70
4.4	Le graphe S_3-S_4	70
4.5	Le graphe S_1-S_1	71
4.6	Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus S_1-S_1)$	71
4.7	Le graphe S_2-S_3	72
4.8	Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus S_2-S_3)$	73
4.9	Le graphe $C_4 \cdot S_4$	73
4.10	Le graphe C_4	74
4.11	Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus C_4)$	75
4.12	Le graphe $C_4 \cdot S_2$	76
4.13	Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus (C_4 \cdot S_2))$	77
5.1	Le graphe $K_{m,n}$	90
5.2	La classe “-UDP”	91
5.3	La classe “/UDP”	92
5.4	La classe “\UDP”	92

5.5	$w_M(g_1) = -\frac{3856}{315} \neq w_M(g_2) = -\frac{1103}{90}$	99
5.6	$w_M(g_1) = \frac{2251}{180} \neq w_M(g_2) = -\frac{2251}{180}$	100
5.7	$w_{RH}(g_1) = 0 \neq w_{RH}(g_2) = -\frac{1}{30}$	100
5.8	$w_{RH}(g_1) = -\frac{1}{360} \neq w_{RH}(g_2) = 0$	101
5.9	$w_{RH}(g_1) = -\frac{1}{5} \neq w_{RH}(g_2) = \frac{1}{5}$	101
6.1	Un graphe connexe g_{10} avec une arborescence couvrante	105
6.2	Variables u_j associées à l'arborescence couvrante, $j = 1, 2, \dots, k$	106
6.3	a) $a_\nu \prec e$, b) $e \prec a_\nu$	108
6.4	Le cycle C_7 et son arborescence croissante	110
6.5	Le graphe $K_4 \setminus e$	111
6.6	Contour Γ^+	127
6.7	Contour Γ^-	127
6.8	Roue[7]	129
6.9	RoueGen[[4, 3, 4, 3, 2], [4, 3, 2, 3, 1]]	132
6.10	Échelle[5]	133

RÉSUMÉ

Nous étudions les poids de graphes (c'est-à-dire, les invariants de graphes) qui apparaissent naturellement dans la théorie de Mayer et la théorie de Ree-Hoover pour le développement du viriel dans le contexte d'un gaz imparfait. Nous portons une attention particulière au deuxième poids $w_M(c)$ de Mayer et au poids $w_{RH}(c)$ de Ree-Hoover d'un graphe 2-connexe c dans le cas d'un gaz à noyaux durs et à positions continues en une dimension.

Ces poids sont calculés à partir de volumes signés de polytopes convexes associés au graphe c en utilisant la méthode des homomorphismes de graphes, que nous avons aussi adaptée au cas du poids de Ree-Hoover, ainsi que les transformées de Fourier.

En faisant appel à l'inversion de Möbius, nous présentons des relations entre les poids de Mayer et de Ree-Hoover. Ces relations nous permettent de donner une définition simple explicite du concept du "star content" introduit par Ree-Hoover et d'analyser certaines de ses propriétés fondamentales.

Parmi nos résultats, nous donnons des tables contenant les valeurs du poids de Mayer et du poids de Ree-Hoover pour tous les graphes 2-connexes de taille au plus 8 ainsi que d'autres paramètres descriptifs. Nous développons aussi des formules explicites pour les poids de Mayer et de Ree-Hoover pour certaines familles de graphes 2-connexes simplement, doublement et triplement infinies, incluant par exemple, le poids de Mayer des graphes bipartis complets $K_{m,n}$.

En analysant les tables précédentes à l'aide du logiciel Maple, nous montrons que les poids de Mayer et de Ree-Hoover ne sont pas exprimables comme des fonctions faisant seulement appel à certains paramètres classiques de la théorie des graphes.

Finalement, nous présentons une méthode générale pour le calcul du poids de Mayer d'un graphe connexe quelconque basée sur les arborescences couvrantes en utilisant les transformées de Fourier. Nous illustrons cette méthode sur des cas particuliers incluant les particules dures en dimension quelconque d . Cette méthode donne aussi lieu à un algorithme de calcul basé sur les différences divisées pour le cas des particules dures en dimension $d = 1$.

Mot-clés : Poids de Mayer, poids de Ree-Hoover, mécanique statistique, méthode des homomorphismes de graphes, transformées de Fourier, gaz imparfaits.

INTRODUCTION

Une *pondération sur les graphes* (simples, finis) est la donnée d'une fonction, dite de poids, définie sur les graphes, qui prend des valeurs scalaires ou polynomiales et qui est invariante sous les isomorphismes, c'est-à-dire, sous les réétiquetages des sommets du graphe.

Etant donné que la plupart des concepts de base de la théorie des graphes partagent cette propriété d'invariance, les exemples de pondérations sur les graphes sont très nombreux. Par exemple, la *complexité* $\gamma(g)$ d'un graphe g , qui est définie comme le nombre maximal de forêts couvrantes de g , est un exemple de poids de graphes. Dans le contexte d'un gaz non idéal dans un volume $V \subseteq \mathbb{R}^d$, le *deuxième poids de Mayer* $w_M(c)$ d'un graphe connexe c , sur l'ensemble $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$ de sommets, est défini par

$$w_M(c) = \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = 0, \quad (1)$$

où $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$ sont des variables dans \mathbb{R}^d qui représentent les positions des n particules dans V ($V \rightarrow \infty$), la valeur $\vec{x}_n = 0$ est arbitrairement fixée, et où $f = f(r)$ est une fonction à valeurs réelles associée au potentiel d'interaction des particules deux à deux, voir (Uhlenbeck et Ford, 1963; Labelle, Leroux et Ducharme, 2007; Thompson, 1972).

Notons par $\mathbb{C}[n]$ l'ensemble de tous les graphes connexes sur l'ensemble $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$. La somme totale des poids de Mayer de tous les graphes connexes sur $[n]$ est notée par

$$|\mathbb{C}[n]|_{w_M} = \sum_{c \in \mathbb{C}[n]} w_M(c). \quad (2)$$

L'intérêt de la suite $|\mathbb{C}[n]|_{w_M}$, $n \geq 1$, en mécanique statistique, provient du fait que la pression P du système est donnée par sa fonction génératrice exponentielle comme suit (voir (Labelle, Leroux

et Ducharme, 2007)) :

$$\frac{P}{kT} = \mathbb{C}_{w_M}(z) = \sum_{n \geq 1} |\mathbb{C}[n]|_{w_M} \frac{z^n}{n!}, \quad (3)$$

où k est une constante, T est la température et z une variable appelée la *fugacité* ou l'*activité* du système. Il est bien connu que le poids de Mayer w_M est multiplicatif sur les composantes 2-connexes. Il suffit donc de calculer les poids de Mayer $w_M(b)$ pour les graphes 2-connexes $b \in \mathcal{B}[n]$ (\mathcal{B} pour *blocs*). De plus, ces poids apparaissent dans le *développement du viriel* proposé par Kamerlingh Onnes, en 1901,

$$\frac{P}{kT} = \rho + \beta_2 \rho^2 + \beta_3 \rho^3 + \dots, \quad (4)$$

où ρ est la densité. En effet, on peut voir que

$$\beta_n = \frac{1-n}{n!} |\mathcal{B}[n]|_{w_M}, \quad (5)$$

où $\mathcal{B}[n]$ est l'ensemble de tous les graphes 2-connexes sur $[n]$ et $|\mathcal{B}[n]|_{w_M}$ est la somme totale des poids de tous les graphes 2-connexes sur $[n]$. Afin de calculer ce développement numériquement, Ree et Hoover (Ree et Hoover, 1964a) ont introduit un poids spécial $w_{RH}(b)$, pour les graphes 2-connexes b , qui simplifie considérablement les calculs. Il est défini par

$$w_{RH}(b) = \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) \prod_{\{i,j\} \in \bar{b}} \bar{f}(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = 0, \quad (6)$$

où $\bar{f}(r) = 1 + f(r)$ et $\bar{b} = K_n \setminus b$ est le graphe complémentaire de b au graphe complet à n sommets K_n . En utilisant ce nouveau poids, Ree et Hoover (Ree et Hoover, 1964a; Ree et Hoover, 1964b; Ree et Hoover, 1967) et plus tard Clisby et McCoy (Clisby et McCoy, 2004; Clisby et McCoy, 2006) ont calculé les coefficients du viriel β_n , pour n jusqu'à 10, en dimension $d \leq 8$, dans le cas d'un gaz à noyaux durs, à savoir lorsque l'interaction est donnée par

$$f(r) = -\chi(r < 1), \quad \bar{f}(r) = \chi(r \geq 1), \quad (7)$$

où χ est la fonction caractéristique ($\chi(P) = 1$, si P est vraie et 0, sinon).

Tandis que les physiciens s'intéressent à la somme de tous les graphes connexes ou 2-connexes

d'un ordre donné, le présent travail se concentre sur les contributions individuelles de graphes et leur signification combinatoire.

Cette thèse est composée de six chapitres visant des objectifs distincts.

Au premier chapitre, nous présentons quelques notions préliminaires de théorie des graphes et de mécanique statistique, incluant un survol de la théorie de Mayer.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons d'abord le développement du viriel. Ensuite, nous présentons le développement de Ree-Hoover, en donnant un exemple dans le cas $n = 4$. Suivent des relations linéaires provenant de l'inversion de Möbius entre le poids de Mayer et le poids de Ree-Hoover. Enfin, nous donnons une formule explicite pour le star content ainsi que certaines de ses propriétés.

Le troisième chapitre est consacré au cas unidimensionnel ($d = 1$). Nous rappelons certains résultats généraux comme la somme des poids de Mayer de tous les graphes connexes ou 2-connexes, ainsi que des résultats spéciaux comme le poids de Mayer du graphe complet et du cycle. Ensuite, nous illustrons la méthode d'Ehrhart, que nous utilisons pour le calcul exact du poids de Mayer et de Ree-Hoover de tous les graphes 2-connexes de taille au plus 8. La méthode combinatoire "des homomorphismes de graphes" qui réduit le calcul des poids de Mayer et de Ree-Hoover au dénombrement de certaines configurations planaires qui représentent une image homomorphe au graphe dans le plan suit. Nous appliquons cette méthode dans le chapitre 4 pour calculer ces poids pour des familles infinies de graphes. Nous terminons le chapitre par l'adaptation de la méthode de Monte-Carlo aux cas des particules dures en dimension quelconque.

Le quatrième chapitre traite de l'évaluation exacte des poids de Mayer et de Ree-Hoover de certaines familles infinies de graphes. Plus précisément, à partir de nos tables (voir Appendice B ainsi que la version électronique (Kaouche et Leroux, 2007c)), nous avons conjecturé diverses formules explicites pour les poids de Mayer et de Ree-Hoover de familles infinies de graphes simplement, doublement et triplement indexées par des entiers. Le but de ce chapitre est d'énoncer et de démontrer rigoureusement ces formules. Nous démontrons ces formules pour le poids de Ree-

Hoover, en adaptant la méthode des homomorphismes de graphes. Pour le poids de Mayer de ces familles nous démontrons ces formules à partir des relations exprimant le poids de Mayer d'un graphe comme somme des poids de Ree-Hoover de ses surgraphes.

Le but du cinquième chapitre est de donner une formule explicite pour le poids de Mayer de la famille doublement indexée $K_{m,n}$ des graphes bipartis complets que nous démontrons de deux façons, en faisant notamment appel à la fonction Bêta d'Euler et certaines de ses propriétés. Nous illustrons aussi la "complexité" de l'interprétation combinatoire du poids de Mayer $w_M(b)$ et du poids de Ree-Hoover $w_{RH}(b)$ en montrant que pour un graphe 2-connexe général b , ces poids ne peuvent pas être exprimés comme fonctions faisant seulement appel à certaines familles classiques d'invariants de graphes.

Dans le dernier chapitre, nous adaptons la méthode des transformées de Fourier dans le but de développer de nouvelles formules exactes ou asymptotiques pour le poids de Mayer. Nous utilisons d'abord la notion d'arborescence couvrante croissante d'un graphe connexe afin d'obtenir un changement de variables qui nous permet ensuite d'exprimer le poids de Mayer, pour une interaction quelconque et en dimension quelconque, sous la forme d'une intégrale dont les variables sont en bijection avec les arêtes de l'arborescence couvrante. En utilisant les transformées de Fourier, nous transformons cette intégrale en une nouvelle intégrale générale dont les variables sont, cette fois, en bijection avec les arêtes complémentaires de l'arborescence couvrante. Cette méthode est illustrée pour divers exemples particuliers. Nous l'utilisons aussi pour obtenir en dimension d , dans le cas des particules dures, des formules exactes et asymptotiques, dans le cas où le graphe est un cycle ("ring diagram"). Nous développons un algorithme de calcul du poids de Mayer dans le cas des particules dures en dimension 1, en utilisant toujours les transformées de Fourier. Cet algorithme fait appel aux différences divisées ainsi qu'à un lemme d'intégration spécial. Enfin, nous illustrons cet algorithme en l'appliquant à divers exemples de graphes, incluant les roues et les graphes échelles.

Nous terminons par quelques problèmes ouverts.

L'appendice A contient une table donnant les valeurs des poids de Mayer et de Ree-Hoover pour tous les graphes 2-connexes de taille ≤ 7 , ainsi que d'autres paramètres qui leur sont associés. Des tables pour la taille 8 sont disponibles en version électronique (voir (Kaouche et Leroux, 2007c)).

L'appendice B contient les diverses procédures Maple qui ont été développées dans cette thèse.

Chapitre I

PRINCIPES DE MÉCANIQUE STATISTIQUE

Ce chapitre, inspiré de (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007) vise à présenter la terminologie, la notation et quelques principes de base relatifs à la mécanique statistique qui seront utilisés tout au long de cette thèse.

1.1 Notions préliminaires sur la théorie des graphes

Avant d'aborder la mécanique statistique proprement dite, nous présentons d'abord quelques notions préliminaires sur la théorie des graphes tirées entre autres de (Labelle, 1981; Leroux, 2004).

Définition 1 *Un graphe simple g est formé de deux ensembles : un ensemble fini non-vide V , appelé l'ensemble des sommets de g , et un ensemble E de paires de sommets, appelé l'ensemble des arêtes de g . On a donc $E \subseteq \mathcal{P}_2(V)$ où $\mathcal{P}_2(V)$ désigne l'ensemble des parties de V ayant deux éléments. On écrit souvent $g = (V, E)$.*

Définition 2 *Un sous-graphe h d'un graphe $g = (V, E)$ est un graphe de la forme $h = (V_0, E_0)$, tel que $V_0 \subseteq V$ et $E_0 = \mathcal{P}_2(V_0) \cap E$.*

Définition 3 *Un surgraphe g d'un graphe $h = (V, E)$ est un graphe de la forme $g = (V_1, E_1)$, tel que $V \subseteq V_1$ et $E = \mathcal{P}_2(V) \cap E_1$.*

Dans le présent travail il sera utile d'identifier un graphe à l'ensemble de ses arêtes, c'est-à-dire $g \subseteq \mathcal{P}_2(V)$.

Définition 4 Dans un graphe simple $g = (V, E)$, une chaîne c est une suite finie de sommets, v_0, v_1, \dots, v_m , telle que pour tout $0 \leq i < m$, $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$. On écrit $c = [v_0, v_1, \dots, v_m]$.

Définition 5 Un graphe $g = (V, E)$ est connexe si $\forall v, w \in V$, il existe une chaîne de v à w .

Tout graphe se décompose de façon unique comme union disjointe de graphes connexes.

Définition 6 Sur l'ensemble V des sommets du graphe simple $g = (V, E)$, on définit la relation d'équivalence suivante : $v \sim w \iff$ il existe une chaîne de v à w dans g . Soit V_1, V_2, \dots, V_k les classes d'équivalence de \sim et posons, pour $1 \leq i \leq k$, $g_i = g_{V_i}$, le sous-graphe de g engendré par V_i . Ces graphes simples g_i , qu'on appelle les composantes connexes de g , sont connexes (voir figure 1.1 où les composantes connexes sont encerclées).

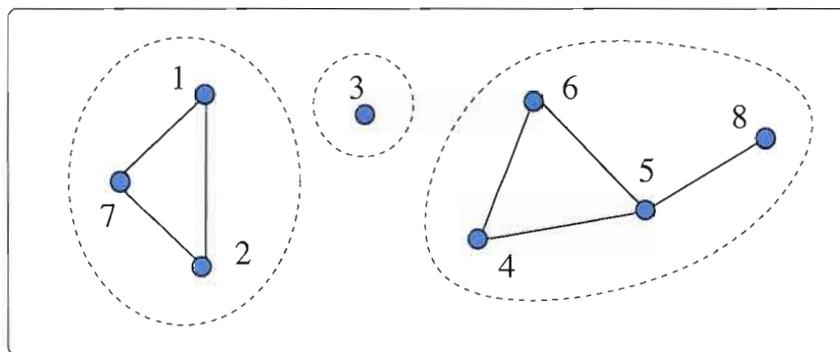


Figure 1.1 Un graphe simple et ses composantes connexes

Définition 7 Un point d'articulation d'un graphe connexe c est un sommet de c dont l'extraction produit un graphe non connexe.

Définition 8 Un graphe connexe n'ayant pas de point d'articulation est appelé 2-connexe (voir figure 1.2).

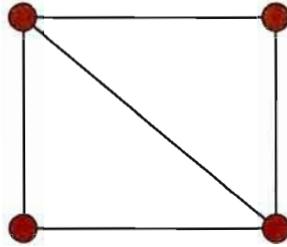


Figure 1.2 Un graphe 2-connexe

Définition 9 Un bloc d'un graphe simple est un sous-graphe 2-connexe maximal sous l'inclusion.

Définition 10 Le bc-arbre d'un graphe connexe c , noté $bc(c)$, est un arbre bi-coloré (blanc-noir) décrivant précisément les liens entre les blocs de c (les sommets blancs de $bc(c)$) et les points d'articulation de c (les sommets noirs de $bc(c)$) (Bergeron, Labelle et Leroux, 1998).

Définition 11 Un bloc-feuille dans un graphe connexe c est un bloc qui est représenté par une feuille dans $bc(c)$. Un tel bloc est relié par un seul point d'articulation au reste du graphe.

Proposition 1 Tout graphe connexe c se décompose de façon unique comme union de graphes 2-connexes (les blocs) reliés entre eux par des points d'articulation (voir figure 1.3).

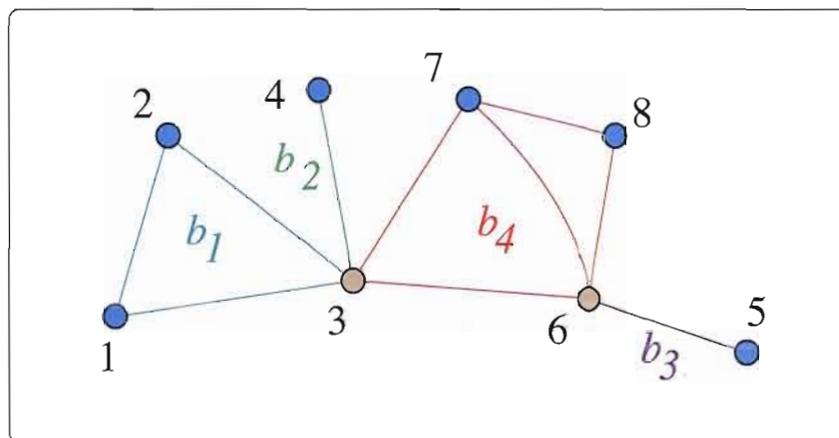


Figure 1.3 Un graphe connexe avec ses blocs b_1, b_2, b_3, b_4 et ses points d'articulation 3, 6

Définition 12 Un graphe biparti complet $K_{m,n}$, $m, n \geq 1$, est un graphe de la forme $K_{m,n} = (V, E)$, tel que $V = \{v_1, v_2, \dots, v_m, w_1, w_2, \dots, w_n\}$ et $E = \{\{v_i, w_j\} | 1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n\}$ (voir figure 1.4).

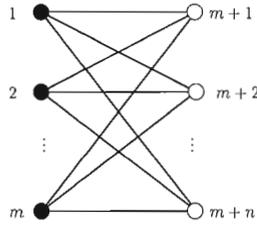


Figure 1.4 Un graphe biparti complet

1.2 Survol de la théorie de Mayer

1.2.1 Un peu de mécanique statistique

Plaçons-nous dans le contexte d'un gaz non idéal formé de n particules interagissant deux à deux à l'intérieur d'une région V de dimension d incluse dans \mathbb{R}^d . Les positions des particules sont données par les vecteurs $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$. Sous la condition que l'influence d'énergies potentielles externes au système est négligeable ou nulle, la fonction de partition est définie par

$$Z(V, T, n) = \frac{1}{n! \lambda^{dn}} \int_V \dots \int_V \exp \left(-\beta \sum_{i < j} \varphi(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) \right) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n, \quad (1.1)$$

où λ et β dépendent de la température T , et où la fonction $\varphi(r)$ décrit l'interaction entre deux particules séparées par une distance r , comme le montre la figure 1.5 a).

La fonction génératrice des fonctions de partition est appelée la distribution grand-canonique. On la note

$$Z_{\text{gr}}(V, T, z) = \sum_{n=0}^{\infty} Z(V, T, n) (\lambda^d z)^n, \quad (1.2)$$

où la variable z est appelée la *fugacité* ou l'*activité*. Les identités entre fonctions génératrices que nous considérons ici sont au sens des séries formelles par rapport à la variable z voir (Ruelle, 1999).

Les paramètres macroscopiques du système peuvent être décrits en terme de cette fonction. Par exemple, la pression P , le nombre moyen de particules \bar{n} et la densité ρ sont définis par

$$\frac{P}{kT} = \frac{1}{V} \log Z_{\text{gr}}(V, T, z), \quad \bar{n} = z \frac{\partial}{\partial z} \log Z_{\text{gr}}(V, T, z) \quad \text{et} \quad \rho := \frac{\bar{n}}{V}, \quad (1.3)$$

où on utilise V pour désigner aussi le volume de la région.

1.2.2 L'approche de Mayer

Afin d'étudier la fonction de partition, le couple (Mayer et Mayer, 1977) a introduit des fonctions auxiliaires f_{ij} définies par

$$f_{ij} = \exp(-\beta\varphi(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)) - 1. \quad (1.4)$$

On voit que $f_{ij} = f(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)$ est fonction de la distance $|\vec{x}_i - \vec{x}_j|$, où

$$f(r) = \exp(-\beta\varphi(r)) - 1. \quad (1.5)$$

Pour assurer l'existence de la fonction de partition $Z(V, T, n)$, on suppose que la fonction φ doit être nulle ou négligeable si la distance entre les particules i et j est plus grande qu'une certaine valeur r_1 . Ceci induit un comportement analogue à celui de f , comme le montre la figure 1.5. Nous verrons plus loin des conditions suffisantes qui nous assurent l'intégrabilité de f .

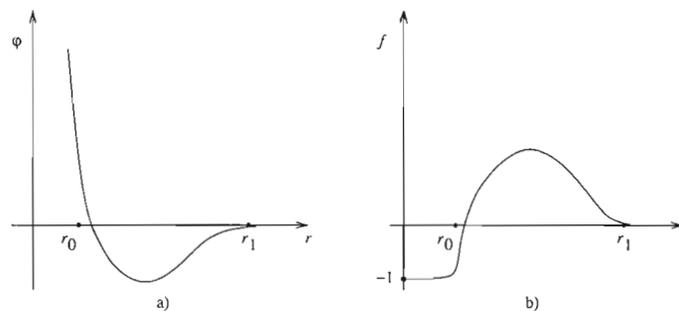


Figure 1.5 Fonctions φ et f

En développant le produit des $(1 + f_{ij})$, on voit que

$$\prod_{1 \leq i < j \leq n} (1 + f_{ij}) = \sum_{g \in \mathcal{G}[n]} \prod_{\{i,j\} \in g} f_{ij}, \quad (1.6)$$

où $\mathcal{G}[n]$ est l'ensemble de tous les graphes simples sur l'ensemble de sommets $\{1, 2, \dots, n\}$. Un tel graphe $g \in \mathcal{G}[n]$ est identifié, rappelons-le, avec l'ensemble de ses arêtes. La fonction de partition (1.1) peut être réécrite de la façon suivante :

$$\begin{aligned} Z(V, T, n) &= \frac{1}{n! \lambda^{dn}} \int_V \cdots \int_V \exp \left(-\beta \sum_{i < j} \varphi(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) \right) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \\ &= \frac{1}{n! \lambda^{dn}} \int_V \cdots \int_V \prod_{i < j} \exp(-\beta \varphi(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \\ &= \frac{1}{n! \lambda^{dn}} \int_V \cdots \int_V \prod_{1 \leq i < j \leq n} (1 + f_{ij}) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \\ &= \frac{1}{n! \lambda^{dn}} \int_V \cdots \int_V \sum_{g \in \mathcal{G}[n]} \prod_{\{i,j\} \in g} f_{ij} d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \\ &= \frac{1}{n! \lambda^{dn}} \sum_{g \in \mathcal{G}[n]} \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in g} f_{ij} d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \\ &= \frac{1}{n! \lambda^{dn}} \sum_{g \in \mathcal{G}[n]} W_M(g), \end{aligned} \quad (1.7)$$

où la fonction W_M est définie par l'intégrale

$$W_M(g) = \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in g} f_{ij} d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n. \quad (1.8)$$

Cette fonction est appelée le *premier poids de Mayer* du graphe g . Il est clair que $W_M(g)$ est invariant sous les isomorphismes de graphes puisque tous les réétiquetages définis par une bijection entre les sommets de deux graphes induisent un changement de variables dont le jacobien est le déterminant de la matrice de permutation correspondante qui transforme une intégrale en l'autre. La fonction de distribution grand-canonique peut aussi s'exprimer en terme du poids W_M . En

combinant les équations (1.2) et (1.7), on obtient

$$\begin{aligned}
Z_{\text{gr}}(V, T, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{n! \lambda^{dn}} \sum_{g \in \mathcal{G}[n]} W_M(g) \right) (\lambda^d z)^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{g \in \mathcal{G}[n]} W_M(g) z^n \\
&= \mathcal{G}_W(z),
\end{aligned} \tag{1.9}$$

c'est-à-dire la série génératrice exponentielle de l'espèce des graphes pondérés par la fonction W_M .

Proposition 2 *La fonction $W_M(g)$, considérée comme une fonction de poids sur les graphes simples, est multiplicative sur les composantes connexes des graphes, c'est-à-dire que si c_1, c_2, \dots, c_m sont les composantes connexes de g , alors*

$$W_M(g) = W_M(c_1)W_M(c_2) \dots W_M(c_m). \tag{1.10}$$

Preuve. Puisque les différentes composantes connexes de g ne possèdent aucun sommet en commun, on peut les étiqueter de façon à ce que les sommets 1 à k_1 soient dans c_1 , $k_1 + 1$ à k_2 dans c_2 , et ainsi de suite jusqu'à $k_m = n$. Ainsi

$$\begin{aligned}
W_M(g) &= \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in g} f_{ij} d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \\
&= \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in c_1} f_{ij} \prod_{\{i,j\} \in c_2} f_{ij} \cdots \prod_{\{i,j\} \in c_m} f_{ij} d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \\
&= \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in c_1} f_{ij} dx_1 \dots dx_{k_1} \times \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in c_2} f_{ij} dx_{k_1+1} \dots dx_{k_2} \times \dots \\
&\quad \cdots \times \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in c_m} f_{ij} dx_{k_{m-1}+1} \dots dx_n \\
&= W_M(c_1) \cdot W_M(c_2) \cdot \dots \cdot W_M(c_m).
\end{aligned} \tag{1.11}$$

■

Par la multiplicativité de la fonction de poids W_M sur les composantes connexes des graphes simples, nous avons la relation

$$\mathcal{G}_W(z) = \exp(\mathcal{C}_W(z)), \quad (1.12)$$

où $\mathcal{C}_W(z)$ est la série génératrice exponentielle de l'espèce \mathcal{C}_W des graphes connexes pondérés par W_M . Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} \log Z_{\text{gr}}(V, T, z) &= \log \mathcal{G}_W(z) \\ &= \log \exp(\mathcal{C}_W(z)) \\ &= \mathcal{C}_W(z) \end{aligned} \quad (1.13)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{c \in \mathcal{C}[n]} W_M(c) z^n. \quad (1.14)$$

Corollaire 1 *La pression du système peut s'écrire en terme de la fonction génératrice exponentielle des graphes connexes pondérés par W_M . Plus précisément,*

$$\frac{P}{kT} = \frac{1}{V} \log Z_{\text{gr}}(V, T, z) = \frac{1}{V} \mathcal{C}_W(z). \quad (1.15)$$

1.2.3 La limite thermodynamique $w_M(c)$

Soit c un graphe 2-connexe sur $\{1, 2, \dots, n\}$. Le deuxième poids de Mayer $w_M(c)$ est défini par :

$$\begin{aligned} w_M(c) &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} W_M(c) \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in c} f_{ij} d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n, \end{aligned} \quad (1.16)$$

où la limite quand V tend vers l'infini est prise au sens suivant : on suppose que la région V de \mathbb{R}^d peut être de différentes formes, par exemple cubique ou sphérique, mais elle doit contenir une boule $B(0, R)$ centrée à l'origine, de rayon $R \in (0, \infty)$. La limite quand V tend vers l'infini signifie que R tend vers l'infini. Rappelons que V désigne à la fois la région et son volume. La proposition suivante donne une condition suffisante pour l'existence de cette limite.

Proposition 3 voir (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007) Si la fonction $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ est intégrable et bornée, et si

$$\int_0^\infty r^{d-1} |f(r)| dr < \infty, \quad (1.17)$$

par exemple si $|f(r)| = O(1/r^{d+\epsilon})$, $r \rightarrow \infty$, pour un certain $\epsilon > 0$, alors pour tout $\vec{x}_n \in \mathbb{R}^d$ fixé, la fonction $F_{\vec{x}_n} : \mathbb{R}^{d(n-1)} \rightarrow \mathbb{R}$, définie par

$$F_{\vec{x}_n}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{n-1}) = \prod_{\{i,j\} \in c} f(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) = \prod_{\{i,j\} \in c} f_{ij} \quad (1.18)$$

est intégrable sur $(\mathbb{R}^d)^{n-1}$ et son intégrale est indépendante de \vec{x}_n . De plus, la limite (1.16) existe et est égale à

$$w_M(c) = \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} f_{ij} d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = \vec{0}. \quad (1.19)$$

Nous utiliserons souvent l'équation (1.19) comme définition alternative de (1.16) pour $w_M(c)$. Notez que l'enracinement au sommet n , pour lequel \vec{x}_n est égal à $\vec{0}$ dans (1.19), peut être remplacé par tout autre sommet. Par exemple, si ce sommet est 1, la formule devient

$$w_M(c) = \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} f_{ij} d\vec{x}_2 \cdots d\vec{x}_n, \quad \vec{x}_1 = \vec{0}. \quad (1.20)$$

Lorsque cette limite existe, la pression, définie à un facteur constant près comme

$$P = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \log Z_{\text{gr}}(V, T, z), \quad (1.21)$$

peut s'exprimer plus simplement en terme des graphes connexes pondérés par w_M :

$$\begin{aligned} \frac{P}{kT} &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \log Z_{\text{gr}}(V, T, z) \\ &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{c \in \mathcal{C}[n]} W_M(c) z^n \right) \end{aligned} \quad (1.22)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{c \in \mathcal{C}[n]} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} W_M(c) z^n \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{c \in \mathcal{C}[n]} w_M(c) z^n \\ &= \mathcal{C}_w(z). \end{aligned} \quad (1.23)$$

Proposition 4 *Lorsque la limite thermodynamique existe, la pression du système est donnée directement par la fonction génératrice exponentielle des graphes connexes pondérés par le deuxième poids de Mayer, $w_M(c)$, par la formule*

$$\frac{P}{kT} = C_w(z). \quad (1.24)$$

1.2.4 Multiplicativité de $w_M(c)$ sur les blocs

Une propriété de w_M est d'être multiplicatif sur les blocs d'un graphe, ou *bloc-multiplicatif*. Cela signifie que pour un graphe connexe composé des blocs b_1, b_2, \dots, b_m ,

$$w_M(c) = w_M(b_1)w_M(b_2) \dots w_M(b_m).$$

Proposition 5 *Pour tout graphe connexe c , la fonction de poids $w_M(c)$ est bloc-multiplicative.*

Preuve. Nous prouverons la propriété par récurrence sur le nombre de blocs de c .

Si c n'est composé que d'un seul bloc, la multiplicativité est triviale. Supposons la propriété vraie pour les graphes connexes composés de m blocs, et considérons le cas d'un graphe connexe c composé de $m + 1$ blocs. Les sommets de c sont étiquetés de 1 à n . Choisissons un bloc-feuille, noté b , de c et notons S l'ensemble de ses sommets. On peut supposer sans perte de généralité que le point d'articulation qui le relie au reste du graphe porte l'étiquette n , et que $S = \{1, 2, \dots, k, n\}$, $|S| = k + 1$. Notons b_1, b_2, \dots, b_m les autres blocs qui composent c . On a ainsi

$$\begin{aligned} w_M(c) &= \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} \prod_{\{i,j\} \in c; \vec{x}_n = \vec{0}} f_{ij} d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_{n-1} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} \prod_{\{i,j\} \in b; \vec{x}_n = \vec{0}} f_{ij} \prod_{\{i,j\} \in c \setminus b; \vec{x}_n = \vec{0}} f_{ij} d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_{n-1} \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} \prod_{\{i,j\} \in b; \vec{x}_n = \vec{0}} f_{ij} d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_k \times \\ &\quad \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} \prod_{\{i,j\} \in c \setminus b; \vec{x}_n = \vec{0}} f_{ij} d\vec{x}_{k+1} d\vec{x}_{k+2} \dots d\vec{x}_{n-1} \\ &= w_M(b) \cdot w_M(c \setminus b). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Comme le graphe $c \setminus b$ reste connexe et est composé de m blocs, on a par hypothèse de récurrence

$$w_M(c) = w_M(b) \cdot w_M(b_1) \cdot w_M(b_2) \cdot \dots \cdot w_M(b_m), \quad (1.26)$$

ce qui montre que la fonction de poids $w_M(c)$ est bloc-multiplicative. ■

Chapitre II

POIDS DE REE-HOOVER VERSUS POIDS DE MAYER

En mécanique statistique, la formule classique

$$\frac{P}{kT} = \frac{N}{V}, \quad (2.1)$$

(ou $PV = NkT$) pour les gaz parfaits a été étendue aux gaz imparfaits à l'aide d'un développement de la forme

$$\frac{P}{kT} = \frac{N}{V} + \beta_2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 + \beta_3 \left(\frac{N}{V}\right)^3 + \dots, \quad (2.2)$$

appelé le développement du viriel, voir (Kaouche et Leroux, 2008a; Kaouche et Leroux, 2008c; Labelle, Leroux et Ducharme, 2007; Leroux, 2004; Mayer et Mayer, 1977; Riddell et Uhlenbeck, 1953; Ruelle, 1999; Uhlenbeck et Ford, 1963), où les coefficients β_n sont donnés par

$$\beta_n = \frac{1-n}{n!} \sum_{b \in \mathcal{B}[n]} w_M(b), \quad n \geq 2, \quad (2.3)$$

où $\mathcal{B}[n]$ est l'ensemble de tous les graphes 2-connexes étiquetés (appelé aussi blocs) sur $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$. Dans (2.1) et (2.2), P , T , V , N et k sont respectivement la pression, la température, le volume, le nombre de particules, et une constante qui dépend du gaz. Les physiciens Ree et Hoover voir (Ree et Hoover, 1964a; Ree et Hoover, 1964b) ont introduit un nouveau poids, noté w_{RH} et appelé depuis poids de Ree-Hoover, qui permet d'exprimer le coefficient du viriel sous la forme d'une combinaison linéaire de poids de Ree-Hoover dont les coefficients sont appelés "star contents". Cette réécriture est importante puisque, pour certains graphes, ce poids est nul ou le star

content est nul.

Voici maintenant la composition de ce chapitre. Dans la section 2.1, nous présentons d'abord le développement du viriel. Ensuite, nous présentons le développement de Ree-Hoover, en montrant sur un exemple comment il peut être appliqué au calcul des coefficients du viriel. Des relations linéaires provenant de l'inversion de Möbius entre le poids de Mayer et le poids de Ree-Hoover en découlent dans la section 2.2. Enfin, en section 2.3, nous donnons une formule explicite pour le "star content" ainsi que certaines de ses propriétés.

2.1 Le développement du viriel et le développement de Ree-Hoover

2.1.1 Le développement du viriel

Afin de mieux expliquer le comportement thermodynamique des gaz imparfaits, Kamerlingh Onnes a proposé, en 1901, un développement en série de la forme

$$\frac{P}{kT} = \rho + \beta_2 \rho^2 + \beta_3 \rho^3 + \dots, \quad (2.4)$$

où $\rho = \frac{N}{V}$ est la densité, appelé le développement du viriel. Un avantage de la théorie de Mayer est qu'elle fournit une approche formelle de ce développement qui donne une interprétation des coefficients du viriel β_n , $n \geq 2$, comme le poids total de l'ensemble $\mathcal{B}[n]$ de tous les graphes 2-connexes étiquetés sur l'ensemble $[n]$ de sommets ; voir (Leroux, 2004) et (Uhlenbeck et Ford, 1963). Plus précisément,

$$\begin{aligned} \beta_n &= \frac{1-n}{n!} |\mathcal{B}[n]|_{w_M} \\ &= \frac{1-n}{n!} \sum_{b \in \mathcal{B}[n]} w_M(b) \\ &= \frac{1-n}{n!} \sum_{b \in T(\mathcal{B}_n)} \ell(b) w_M(b), \end{aligned} \quad (2.5)$$

où la sommation en (2.5) est prise sur un ensemble de représentants de l'ensemble $T(\mathcal{B}_n)$ des types d'isomorphie des graphes 2-connexes ayant n sommets, et $\ell(b)$ est le nombre d'étiquetages du graphe b .

2.1.2 Poids de Ree-Hoover et poids de Mayer

Une réécriture importante des coefficients du viriel a été présentée par Ree et Hoover (Ree et Hoover, 1964a; Ree et Hoover, 1964b) en introduisant la fonction

$$\bar{f}(r) = 1 + f(r) \quad (2.6)$$

et en définissant un nouveau poids (noté $w_{RH}(b)$) pour les graphes 2-connexes b , par

$$w_{RH}(b) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_V \cdots \int_V \prod_{\{i,j\} \in b} f_{ij} \prod_{\{i,j\} \in \bar{b}} \bar{f}_{ij} d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_n, \quad (2.7)$$

où $\bar{b} = K_n \setminus b$ est le complémentaire du graphe b par rapport au graphe complet K_n , puis en développant chaque poids de Mayer $w_M(b)$ en substituant $1 = \bar{f} - f$ pour chaque paire de sommets qui ne sont pas reliés par une arête. Avec cette réécriture du poids de Mayer, les paires de sommets de chaque graphe sont reliés ou bien par les liens f (des lignes continues) ou bien par les liens \bar{f} (des lignes pointillées). Par exemple, on a

$$w_M(\text{diagramme 1}) = w_{RH}(\text{diagramme 2}), \quad (2.8)$$

$$w_M(\text{diagramme 3}) = w_{RH}(\text{diagramme 4}) - w_{RH}(\text{diagramme 5}), \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} w_M(\text{diagramme 6}) &= w_{MRH}(\text{diagramme 7}) - w_M(\text{diagramme 8}) \\ &= \{w_{RH}(\text{diagramme 9}) - w_{RH}(\text{diagramme 10})\} - \{w_{RH}(\text{diagramme 11}) - w_{RH}(\text{diagramme 12})\} \\ &= w_{RH}(\text{diagramme 13}) - 2 \cdot w_{RH}(\text{diagramme 14}) + w_{RH}(\text{diagramme 15}). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Proposition 6 *La limite (2.7) existe sous les mêmes conditions que celles de la proposition 3 et, est égale à*

$$w_{RH}(b) = \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} f_{ij} \prod_{\{i,j\} \in \bar{b}} \bar{f}_{ij} d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = \vec{0}. \quad (2.11)$$

En effet, en développant le produit $\prod_{\{i,j\} \in \bar{b}} \bar{f}_{ij}$, on trouve que le poids de Ree-Hoover est une somme finie de poids de Mayer (voir proposition 7).

Remarque 1 Notons que, contrairement au poids de Mayer, le poids de Ree-Hoover n'est pas multiplicatif sur les composantes 2-connexes d'un graphe connexe. En effet, pour le graphe



on a, d'une part

$$\begin{aligned} w_{RH}(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) &= w_M(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) + 2w_M(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) + w_M(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) \\ &= \{w_M(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) \cdot w_M(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array})\} + 2w_M(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) + w_M(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) \\ &= 3 \cdot 2 + 2 \cdot \frac{14}{3} + 4 \\ &= \frac{58}{3}. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Et d'autre part,

$$\begin{aligned} w_{RH}(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) \cdot w_{RH}(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) &= 3 \cdot 2 \\ &= 6. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Alors, de (2.12) et (2.13), on obtient

$$w_{RH}(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) \neq w_{RH}(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}) \cdot w_{RH}(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array}).$$

Remarque 2 Par définition du poids de Ree-Hoover, on a en particulier

$$w_{RH}(K_n) = w_M(K_n), \quad n \geq 2. \tag{2.14}$$

2.2 Relations entre le poids de Mayer w_M et le poids de Ree-Hoover w_{RH}

Dans cette section, nous donnons des relations linéaires permettant d'exprimer les poids de Mayer d'un graphe en fonction des poids de Ree-Hoover de ses surgraphes (et vice versa). En général, le calcul de ces poids est difficile, particulièrement, celui du poids de Mayer, même dans le cas des gaz à noyaux durs et à positions continues en dimension 1. Nous avons pu calculer explicitement

le poids de Ree-Hoover pour certaines familles de graphes, en utilisant la méthode des homomorphismes de graphes (voir chapitre 3). Tandis que pour le poids de Mayer nous utilisons les relations (2.16) et (2.17), d'où leur importance.

Proposition 7 *Pour un graphe 2-connexe b , on a*

$$w_{RH}(b) = \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} w_M(d), \quad (2.15)$$

$$w_M(b) = \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} (-1)^{e(d)-e(b)} w_{RH}(d), \quad (2.16)$$

où $e(d)$ désigne le nombre d'arêtes du graphe d . Dans le cas d'un gaz à noyaux durs et à positions continues en une dimension (voir chapitre 3), on a aussi

$$|w_M(b)| = \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} |w_{RH}(d)|. \quad (2.17)$$

Preuve. À partir de l'équation (2.11) et le fait que $\bar{f} = 1 + f$, on obtient

$$\begin{aligned} w_{RH}(b) &= \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) \prod_{\{i,j\} \in \bar{b}} \bar{f}(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = 0 \\ &= \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in b} f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) \prod_{\{i,j\} \in \bar{b}} (1 + f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|)) d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = 0 \\ &= \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \sum_{E \subseteq \bar{b}} \prod_{\{i,j\} \in E \cup b} f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = 0 \\ &= \int_{(\mathbb{R}^d)^{n-1}} \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} \prod_{\{i,j\} \in d} f(\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_{n-1}, \quad \vec{x}_n = 0 \\ &= \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} w_M(d). \end{aligned}$$

En utilisant l'inversion de Möbius sur l'équation (2.15), avec la fonction de Möbius $\mu(b, d) = (-1)^{e(d)-e(b)}$, on obtient (2.16).

En prenant en considération le fait que dans le cas d'un gaz à noyaux durs et à positions continues

en une dimension, les fonctions f et \bar{f} sont données par :

$$f_{ij} = -\chi(|x_i - x_j| < 1), \quad \bar{f}_{ij} = 1 + f_{ij} = \chi(|x_i - x_j| \geq 1), \quad (2.18)$$

on peut écrire (2.16) comme $(-1)^{e(b)}w_M(b) = \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} (-1)^{e(d)}w_{RH}(d)$. C'est exactement (2.17). ■

2.3 Le star content et ses propriétés

Le développement de chaque poids de Mayer $w_M(b)$, en substituant $1 = \bar{f} - f$ pour chaque paire de sommets qui ne sont pas reliés par une arête, fait apparaître pour chaque graphe un nouveau facteur appelé *star content* par Ree et Hoover (Ree et Hoover, 1964b). Il peut être positif ou négatif.

Dans cette section, nous donnons d'abord une formule explicite pour le star content d'un graphe 2-connexé. Nous montrons ensuite que la somme totale des star content de tous les graphes 2-connexés est égale à 1. On termine en démontrant des formules de récurrence permettant d'exprimer le star content de familles de graphes à l'aide de celui d'autres graphes de tailles inférieures. Nous utilisons ces formules pour construire des procédures Maple pour calculer le star content d'un graphe 2-connexé (voir appendice B).

2.3.1 Formule explicite du star content

Nous donnons ici, une formule explicite qui permet de calculer le star content d'un graphe 2-connexé. Cette formule est énoncée sous des formes différentes dans (Ree et Hoover, 1964b; Clisby, 2004).

Définition 13 Soit d un graphe 2-connexé sur l'ensemble $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$. Alors, le star content du graphe d , $\bar{a}_n(d)$, est donné par

$$\bar{a}_n(d) = \sum_{\substack{b \subseteq d \\ b \in \mathcal{B}[n]}} (-1)^{e(d) - e(b)}. \quad (2.19)$$

Proposition 8 *Le poids total de Mayer, $|\mathcal{B}[n]|_{w_M}$, de l'ensemble de tous les graphes 2-connexes sur l'ensemble $[n]$ est donné par*

$$|\mathcal{B}[n]|_{w_M} = \sum_{d \in \mathcal{B}[n]} \bar{a}_n(d) w_{RH}(d). \quad (2.20)$$

Preuve. En utilisant l'équation (2.16) on peut écrire $|\mathcal{B}[n]|_{w_M}$ comme

$$\begin{aligned} |\mathcal{B}[n]|_{w_M} &= \sum_{b \in \mathcal{B}[n]} w_M(b) \\ &= \sum_{b \in \mathcal{B}[n]} \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} (-1)^{e(d)-e(b)} w_{RH}(d) \\ &= \sum_{d \in \mathcal{B}[n]} \sum_{\substack{b \subseteq d \\ b \in \mathcal{B}[n]}} (-1)^{e(d)-e(b)} w_{RH}(d) \\ &= \sum_{d \in \mathcal{B}[n]} \bar{a}_n(d) w_{RH}(d). \end{aligned}$$

■

On peut donc écrire le coefficient du viriel β_n comme suit :

$$\beta_n = \frac{1-n}{n!} \sum_{b \in \mathcal{B}[n]} \bar{a}_n(b) w_{RH}(b). \quad (2.21)$$

Notons que puisque w_{RH} est un invariant de graphe, alors la somme (2.20) peut être simplifiée comme suit

$$|\mathcal{B}[n]|_{w_M} = \sum_{b \in T(\mathcal{B}_n)} \ell(b) \bar{a}_n(b) w_{RH}(b), \quad (2.22)$$

où la sommation en (2.22) est prise sur un ensemble de représentants de l'ensemble $T(\mathcal{B}_n)$ des types d'isomorphie des graphes 2-connexes ayant n sommets, et $\ell(b)$ est le nombre d'étiquetages du graphe b .

Par exemple, en utilisant les trois équations (2.8), (2.9) et (2.10), le poids total $|\mathcal{B}[4]|_{w_M}$ peut être

réécrit sous la forme

$$\begin{aligned}
|\mathcal{B}[4]|_{w_M} &= 1 \cdot w_M(\text{diag}) + 6 \cdot w_M(\text{diag}) + 3 \cdot w_M(\text{diag}) \\
&= (-2) \cdot w_{RH}(\text{diag}) + 0 \cdot w_{RH}(\text{diag}) + 3 \cdot w_{RH}(\text{diag}) \\
&= 1 \cdot (-2) \cdot w_{RH}(\text{diag}) + 6 \cdot 0 \cdot w_{RH}(\text{diag}) + 3 \cdot 1 \cdot w_{RH}(\text{diag}), \quad (2.23)
\end{aligned}$$

où les coefficients $(-2), 0, 1$ sont les star content des graphes , , , respectivement.

Proposition 9 *On a*

$$\sum_{d \in \mathcal{B}[n]} \bar{a}_n(d) = 1, \quad (2.24)$$

où $\mathcal{B}[n]$ est l'ensemble de tous les graphes 2-connexes sur l'ensemble $[n]$.

Preuve. On a successivement

$$\begin{aligned}
\sum_{d \in \mathcal{B}[n]} \bar{a}_n(d) &= \sum_{d \in \mathcal{B}[n]} \sum_{\substack{b \subseteq d \\ b \in \mathcal{B}[n]}} (-1)^{e(d)-e(b)} \\
&= \sum_{b \in \mathcal{B}[n]} \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} (-1)^{e(d)-e(b)} \\
&= \sum_{K_n \subseteq d \subseteq K_n} (-1)^{e(d)-e(K_n)} + \sum_{\substack{b \in \mathcal{B}[n] \\ b \neq K_n}} \sum_{b \subseteq d \subseteq K_n} (-1)^{e(d)-e(b)} \\
&= 1 + \sum_{\substack{b \in \mathcal{B}[n] \\ b \neq K_n}} \sum_{\substack{\emptyset \subseteq c \subseteq K_n \setminus b}} (-1)^{e(c)} \\
&= 1.
\end{aligned}$$

■

2.3.2 Relations de récurrence pour le star content

La proposition suivante est énoncée sans preuve dans (Ree et Hoover, 1964b). Cet article renvoie le lecteur à celui de (Hoover et Poirier, 1962) qui donne une idée de la preuve. Cette proposition établit une relation de récurrence pour le star content. Nous en donnons ici une preuve détaillée.

On dit qu'un graphe simple g sur l'ensemble $[n]$ est une *extension* d'un autre graphe h sur l'ensemble $[n - 1]$, si g est obtenu à partir du graphe h en ajoutant un nouveau sommet n et un ensemble (possiblement vide) d'arêtes entre n et le graphe h . Désignons $g|_{[n-1]} = g \setminus n$ la restriction du graphe g à l'ensemble $[n - 1]$ (c'est-à-dire, le sommet n et toutes ses arêtes incidentes sont enlevées).

Proposition 10 Soit $K_{n-1} \setminus \beta$ un graphe 2-connexe de taille $n - 1$ obtenu en enlevant du graphe K_{n-1} un sous-graphe isomorphe au graphe β , où β est de taille au plus $n - 1$. Alors, on a

$$\bar{a}_n(K_n \setminus \beta) = (-1)^{n-1} (n - 2) \bar{a}_{n-1}(K_{n-1} \setminus \beta). \quad (2.25)$$

Afin de prouver cette proposition, nous avons d'abord besoin des trois lemmes suivants :

Lemme 1 Soit $e = \{a, b\}$ une arête d'un graphe 2-connexe G où le sommet a est un point d'articulation du graphe $G \setminus b$. Alors, $G \setminus e$ est 2-connexe.

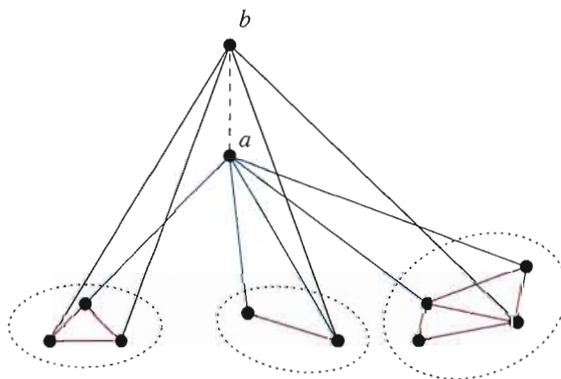


Figure 2.1 Un graphe 2-connexe G ainsi que les composantes connexes de $G \setminus b \setminus a$

Preuve. Il suffit de montrer que le graphe $G \setminus e$ n'a aucun point d'articulation. Puisque G est 2-connexe, alors $G \setminus b = G \setminus e \setminus b$ et $G \setminus a = G \setminus e \setminus a$ sont connexes, ainsi a et b ne sont pas des points d'articulation de $G \setminus e$. Pour tout autre sommet c , $G \setminus c$ est toujours connexe et $G \setminus e \setminus c$ est aussi

connexe. En effet, puisque a est un point d'articulation de $G \setminus b$ et que G est 2-connexe, alors a et b sont reliés dans G aux composantes connexes de $G \setminus b \setminus a$; voir figure 2.1. Le graphe $G \setminus e$ est donc 2-connexe. ■

Lemme 2 Soit h un graphe 2-connexe sur l'ensemble $[n - 1]$. Alors on a

$$\sum_{\substack{g \in \mathcal{B}[n] \\ g \setminus n = h}} (-1)^{e(g) - e(h)} = n - 2. \quad (2.26)$$

Preuve. Pour un graphe 2-connexe h sur l'ensemble $[n - 1]$, considérons l'ensemble

$$A = \{g \mid g \text{ est un graphe simple sur } [n] \text{ et } g \setminus n = h\},$$

et définissons une fonction de poids w sur l'ensemble A par

$$w(g) = (-1)^{e(g) - e(h)}, \quad \forall g \in A.$$

Considérons l'involution suivante Inv_1 qui agit sur l'ensemble A :

$$\text{Inv}_1(g) = \begin{cases} g \setminus \{1, n\}, & \text{si } \{1, n\} \in g, \\ g \cup \{1, n\}, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le poids total de l'ensemble A , $|A|_w$, est donné par

$$|A|_w = \sum_{g \in A} (-1)^{e(g) - e(h)} = |\text{Fix Inv}_1|_w,$$

où Fix Inv_1 est l'ensemble des points fixes de l'involution Inv_1 . Il est facile de voir que Inv_1 n'a pas de point fixe. Par conséquent,

$$|A|_w = \sum_{g \setminus n = h} (-1)^{e(g) - e(h)} = 0. \quad (2.27)$$

De plus, il y a $n - 1$ façons différentes d'obtenir une extension g en ajoutant une arête unique entre n et h pour tout graphe 2-connexe h de taille $n - 1$. Dans ce cas, le graphe g n'est pas 2-connexe. De la même façon, il y a seulement une extension g de h en ajoutant le sommet n sans nouvelle

arête et donc g n'est également pas connexe. Si on ajoute le sommet n et deux arêtes ou plus au graphe h , g est toujours 2-connexe. On peut donc écrire l'équation (2.27) comme

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{g \in \mathcal{B}[n] \\ g \setminus n = h}} (-1)^{e(g) - e(h)} &= - \sum_{\substack{g \notin \mathcal{B}[n] \\ g \setminus n = h}} (-1)^{e(g) - e(h)} \\ &= -(-(n-1) + 1) \\ &= n - 2. \end{aligned}$$

Ce qui conclut la preuve. ■

Lemme 3 *Soit h un graphe connexe sur l'ensemble $[n-1]$ mais non 2-connexe. Alors, on a*

$$\sum_{\substack{g \in \mathcal{B}[n] \\ g \setminus n = h}} (-1)^{e(g)} = 0. \quad (2.28)$$

Preuve. Pour un graphe h sur l'ensemble $[n-1]$ mais non 2-connexe, considérons l'ensemble

$$B = \{g \mid g \text{ est un graphe } 2\text{-connexe sur } [n] \text{ et } g \setminus n = h\}.$$

Soit a le point d'articulation de h ayant la plus petite étiquette. Définissons la fonction de poids suivante w sur l'ensemble B :

$$w(g) = (-1)^{e(g)}, \quad \forall g \in B.$$

Considérons l'involution Inv_2 qui agit sur l'ensemble B :

$$\text{Inv}_2(g) = \begin{cases} g \setminus \{a, n\}, & \text{si } \{a, n\} \in g, \\ g \cup \{a, n\}, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Notons que $\text{Inv}_2(g)$ est 2-connexe par le lemme 1. Nous en déduisons que le poids total de l'ensemble B , $|B|_w$, est donné par

$$|B|_w = \sum_{g \in B} (-1)^{e(g)} = |\text{Fix } \text{Inv}_2|_w,$$

où Fix Inv_2 est l'ensemble des points fixes de l'involution Inv_2 . Encore une fois, l'involution Inv_2 n'a pas de point fixe. Par conséquent,

$$|B|_w = \sum_{g \setminus n = h} (-1)^{e(g)} = 0.$$

■

Nous sommes maintenant en mesure de prouver la proposition 10.

Preuve. (de la proposition 10)

Désignons par $\mathbb{C}[n]$ l'ensemble de tous les graphes connexes sur l'ensemble $[n]$.

À partir de l'équation (2.19) on a successivement

$$\begin{aligned} \bar{a}_n(K_n \setminus \beta) &= \sum_{\substack{g \subseteq K_n \setminus \beta \\ g \in \mathcal{B}[n]}} (-1)^{e(g) - e(K_n \setminus \beta)} \\ &= \sum_{\substack{g \subseteq K_n \setminus \beta \\ g \in \mathcal{B}[n]}} (-1)^{e(g) - \binom{n}{2} - e(\beta)} \\ &= (-1)^{\binom{n}{2}} \left[\sum_{\substack{g \subseteq K_n \setminus \beta \\ g \in \mathcal{B}[n]; g \setminus n \in \mathcal{B}[n-1]}} (-1)^{e(g) + e(\beta)} + \sum_{\substack{g \subseteq K_n \setminus \beta \\ g \in \mathcal{B}[n]; g \setminus n \in \mathbb{C}[n-1]; g \setminus n \notin \mathcal{B}[n-1]}} (-1)^{e(g) + e(\beta)} \right] \\ &= (-1)^{\binom{n}{2}} \left[\sum_{\substack{h \subseteq K_{n-1} \setminus \beta \\ h \in \mathcal{B}[n-1]}} \sum_{\substack{g \in \mathcal{B}[n] \\ g \setminus n = h}} (-1)^{e(g) + e(\beta)} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\substack{h \subseteq K_{n-1} \setminus \beta \\ h \notin \mathcal{B}[n-1]; h \in \mathbb{C}[n-1]}} \sum_{\substack{g \in \mathcal{B}[n] \\ g \setminus n = h}} (-1)^{e(g) + e(\beta)} \right] \\ &= (-1)^{n-1} \sum_{\substack{h \subseteq K_{n-1} \setminus \beta \\ h \in \mathcal{B}[n-1]}} (-1)^{e(h) - \binom{n-1}{2} - e(\beta)} (n-2) + 0 \quad (\text{par le lemme 2 et le lemme 3}) \\ &= (-1)^{n-1} (n-2) \bar{a}_{n-1}(K_{n-1} \setminus \beta). \end{aligned}$$

■

Corollaire 2 Soit $n > m \geq 2$. Alors, pour tout graphe 2-connexe $K_m \setminus \beta$ de taille m , où β est de taille au plus m , on a

$$\bar{a}_n(K_n \setminus \beta) = (-1)^{\binom{n}{2} - \binom{m}{2}} \frac{(n-2)!}{(m-2)!} \bar{a}_m(K_m \setminus \beta). \quad (2.29)$$

Preuve. En appliquant plusieurs fois la formule (2.25), on obtient :

$$\begin{aligned} \bar{a}_n(K_n \setminus \beta) &= (-1)^{(n-1)+(n-2)+\dots+m} (n-2)(n-3) \cdots (m-1) \bar{a}_m(K_m \setminus \beta) \\ &= (-1)^{\binom{n}{2} - \binom{m}{2}} \frac{(n-2)!}{(m-2)!} \bar{a}_m(K_m \setminus \beta). \end{aligned}$$

■

Remarque 3 En plus de réduire le calcul du star content d'un graphe à celui d'un graphe plus simple, le corollaire 2 permet d'affirmer que si le star content du plus petit graphe 2-connexe de la forme $K_m \setminus \beta$ est nul alors, tous les graphes de la forme $K_n \setminus \beta$, $n > m$, ont un star content nul.

Corollaire 3 En particulier, en prenant $\beta = \emptyset$ et $m = 2$ dans l'équation (2.29) on obtient, pour $n > 2$,

$$\bar{a}_n(K_n) = (-1)^{\binom{n}{2} + 1} (n-2)!. \quad (2.30)$$

Preuve. En effet, de (2.19) et (2.29), on obtient

$$\begin{aligned} \bar{a}_n(K_n) &= \bar{a}_n(K_n \setminus \emptyset) \\ &= (-1)^{\binom{n}{2} - 1} (n-2)! \cdot \bar{a}_n(K_2) \\ &= (-1)^{\binom{n}{2} + 1} (n-2)! \cdot 1. \end{aligned}$$

■

Chapitre III

GAZ À NOYAUX DURS ET À POSITIONS CONTINUES EN UNE DIMENSION

Le calcul des poids de Mayer et de Ree-Hoover en dimension quelconque est difficile en général et a surtout été effectué par des méthodes d'intégration numérique sauf dans des cas particuliers où la fonction de densité a une forme très spécifique, par exemple dans le cas gaussien (voir chapitre 5 section 5.2.1).

Le présent chapitre est consacré au cas unidimensionnel ($d = 1$) des particules dites "dures" où la fonction d'interaction est donnée par

$$f_{ij} = -\chi(|x_i - x_j| < 1), \quad (3.1)$$

χ désignant la fonction caractéristique prenant les valeurs 0 et 1. Nous développons des méthodes de calcul exact en faisant appel à la combinatoire. Voici comment le chapitre est composé. Dans la section 3.1, nous nous plaçons dans le contexte des gaz à noyaux durs et rappelons certains résultats généraux comme la somme des poids de Mayer de tous les graphes connexes ou 2-connexes, ainsi que des résultats spéciaux comme le poids de Mayer du graphe complet et du cycle. En section 3.2, nous présentons des conditions assurant la nullité du poids de Ree-Hoover pour certains graphes, dans le cas d'un gaz à noyaux durs et à positions continues en une dimension. Ces conditions sont basées sur certains lemmes et définitions spéciales de la théorie des graphes. Ensuite, dans la section 3.3, nous illustrons la méthode d'Ehrhart, que nous utilisons pour le calcul exact du poids de Mayer et de Ree-Hoover de tous les graphes 2-connexes de taille au plus 8. Les sections 3.4 et

3.5 sont consacrées à la méthode combinatoire dite “des homomorphismes de graphes” qui réduit le calcul des poids de Mayer et de Ree-Hoover au dénombrement de certaines configurations planaires qui représentent une image homomorphe du graphe dans le plan. Nous appliquons cette méthode dans le chapitre 4 pour calculer ces poids pour des familles infinies de graphes. Nous terminons le chapitre par la section 3.6, en adaptant la méthode de Monte-Carlo au cas des particules dures en dimension quelconque en faisant appel à une arborescence couvrante.

3.1 Gaz à noyaux durs en une dimension

Plaçons-nous dans le contexte d’un *gaz à noyaux durs*, c’est-à-dire d’un gaz dont deux particules quelconques ne peuvent pas se déformer ou s’interpénétrer lorsqu’elles entrent en collision, comme des boules de billard. L’interaction exige que la distance entre les centres de ces particules soit toujours plus grande ou égale à leur diamètre. Dans le cas d’une dimension, on considère n particules de diamètre 1 sur un segment de droite de la forme $[-\frac{V}{2}, \frac{V}{2}]$ (voir figure 3.1).

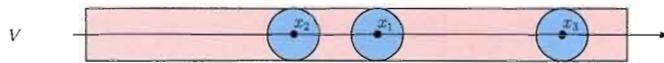


Figure 3.1 Particules dures sur un segment de droite de la forme $[-\frac{V}{2}, \frac{V}{2}]$

La contrainte des noyaux durs se traduit par un potentiel d’interaction φ , tel que $\varphi(r) = \infty$, si $r < 1$, et $\varphi(r) = 0$, si $r \geq 1$. Les fonctions de Mayer f_{ij} et de Ree-Hoover \bar{f}_{ij} sont alors données par

$$f_{ij} = -\chi(|x_i - x_j| < 1), \quad \bar{f}_{ij} = 1 + f_{ij} = \chi(|x_i - x_j| \geq 1), \quad (3.2)$$

où χ désigne la fonction caractéristique prenant les valeurs 0 et 1. Les hypothèses de la proposition 3 sont vérifiées pour la fonction

$$f_{ij} = -\chi(r < 1), \quad (3.3)$$

permettant d'écrire le poids de Mayer $w_M(c)$ d'un graphe connexe c sous la forme

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_i - x_j| < 1) dx_1 \dots dx_{n-1}, \quad x_n = 0, \quad (3.4)$$

où $e(c)$ est le nombre d'arêtes du graphe c et le poids de Ree-Hoover $w_{RH}(c)$ d'un graphe 2-connexe c sous la forme

$$w_{RH}(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_i - x_j| < 1) \prod_{\{i,j\} \in \bar{c}} \chi(|x_i - x_j| > 1) dx_1 \dots dx_{n-1}, \quad x_n = 0, \quad (3.5)$$

où $\bar{c} = K_n \setminus c$ est le graphe complémentaire de c .

3.1.1 Résultats généraux et spéciaux

Proposition 11 (Brydges et Imbrie, 2003; Labelle, Leroux et Ducharme, 2007). *Dans la limite thermodynamique, la pression d'un modèle de gaz à noyaux durs et à positions continues en une dimension est donnée par*

$$\frac{P}{kT} = L(z), \quad (3.6)$$

où $L(z)$ désigne la fonction de Lambert (aussi désignée par $W(z)$, voir (Corless et al., 1996)), définie par l'équation fonctionnelle

$$L(z) \exp(L(z)) = z. \quad (3.7)$$

Corollaire 4 (Bernardi, 2008; Labelle, Leroux et Ducharme, 2007). *Soit n un entier ≥ 1 . Le poids total de Mayer $|\mathcal{C}[n]|_{w_M}$ de l'ensemble de tous les graphes connexes sur l'ensemble $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$ de sommets est donné par*

$$\sum_{c \in \mathcal{C}[n]} w_M(c) = (-n)^{n-1}. \quad (3.8)$$

Voici une proposition tirée de (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007) qui donne le poids total de Mayer des graphes 2-connexes. Nous en donnons une nouvelle preuve basée sur le fait que dans

le cas des particules dures en dimension 1, on a pour tout graphe 2-connexe b ,

$$w_{RH}(b) = 0 \quad \text{ou} \quad \bar{a}_n(b) = 0, \quad \text{pour} \quad b \neq K_n, \quad (3.9)$$

voir (Ree et Hoover, 1964a; Ree et Hoover, 1964b; Clisby et McCoy, 2004).

Proposition 12 *Soit n un entier ≥ 1 . Le poids total de Mayer $|\mathcal{B}[n]|_{w_M}$ de l'ensemble de tous les graphes 2-connexes sur l'ensemble $[n]$ de sommets est donné par*

$$\sum_{c \in \mathcal{B}[n]} w_M(c) = (-n)(n-2)!. \quad (3.10)$$

Preuve. Par l'équation (2.30), on a

$$\bar{a}_n(K_n) = (-1)^{\binom{n}{2}+1} (n-2)!. \quad (3.11)$$

Des équations (2.14) et (3.14), on tire

$$w_{RH}(K_n) = (-1)^{\binom{n}{2}} n. \quad (3.12)$$

En faisant appel à (3.11), (3.12) et (3.9), on obtient immédiatement :

$$\begin{aligned} |\mathcal{B}[n]|_{w_M} &= \sum_{b \in \mathcal{B}[n]} \bar{a}_n(b) w_{RH}(b) \\ &= \bar{a}_n(K_n) w_{RH}(K_n) \\ &= (-n)(n-2)!. \end{aligned}$$

■

Corollaire 5 (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007). *Le développement du viriel dans le cas des gaz à noyaux durs en une dimension est donné par*

$$\frac{P}{kT} = \frac{\rho}{1-\rho}, \quad (3.13)$$

où ρ est la densité.

Proposition 13 (Ducharme, 2004; Labelle, Leroux et Ducharme, 2007). *On a les valeurs spécifiques suivantes des poids de Mayer :*

1. *Pour le graphe complet K_n ,*

$$w_M(K_n) = (-1)^{\binom{n}{2}} n. \quad (3.14)$$

2. *Pour le cycle (non orienté) C_n à n sommets,*

$$w_M(C_n) = \frac{(-1)^n}{(n-1)!} \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor} (-1)^i \binom{n}{i} (n-2i)^{n-1}, \quad (3.15)$$

où $\lfloor x \rfloor$ désigne la partie entière du nombre x .

3. *Pour $n \geq 3$, désignons par $K_n \setminus e$ le graphe complet sur n sommets dont on a enlevé une arête arbitraire. Alors,*

$$w_M(K_n \setminus e) = (-1)^{\binom{n}{2}-1} \left(n + \frac{2}{(n-1)} \right). \quad (3.16)$$

3.2 Pourquoi certains graphes ont le poids de Ree-Hoover égal à 0

Lorsque l'on effectue la transformation de Ree-Hoover, on remarque que le star content de plusieurs graphes est nul. Ces graphes ne contribuent donc pas dans le calcul du coefficient du viriel. De plus, certains graphes peuvent aussi avoir un poids de Ree-Hoover nul pour des raisons géométriques. Dans le cas d'un gaz à noyaux durs et à positions continues en une dimension, nous avons trouvé des conditions suffisantes, pour certaines familles de graphes qui garantissent aussi la nullité de leur poids de Ree-Hoover. Avant de donner ces conditions suffisantes, introduisons d'abord quelques nouvelles variantes utiles de la notion de sous-graphe d'un graphe ainsi que deux lemmes qui lui sont associés.

Définition 14 *Soit g un graphe simple sur l'ensemble U de sommets et g' sous-graphe de g sur l'ensemble $U' \subseteq U$ de sommets. On dit que g' est induit par g si*

$$g' = g \cap K_{U'}, \quad (3.17)$$

où $K_{U'}$ est le graphe complet sur l'ensemble U' . Si un graphe h est isomorphe à un sous-graphe induit de g , on écrit $h \overline{\subseteq} g$.

Lemme 4 Soit g (resp. h) un graphe simple sur l'ensemble U (resp. V). Alors on a

$$h \overline{\subseteq} g \Leftrightarrow K_V \setminus h \overline{\subseteq} K_U \setminus g. \quad (3.18)$$

Preuve. Ceci suit directement de la définition. ■

Définition 15 Soient g et h deux graphes simples. On dit que h est un sous-graphe tilda de g , et on écrit $h \tilde{\subseteq} g$, si h est isomorphe à un sous-graphe de g , c'est-à-dire, s'il existe une injection

$$j : h \hookrightarrow g. \quad (3.19)$$

Lemme 5 Soit C_n , $n \geq 5$, le n -cycle (non orienté). Alors

$$C_n \tilde{\subseteq} K_n \setminus C_n. \quad (3.20)$$

Preuve. On a $K_n \setminus C_n = K_n \setminus \{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \dots, \{n-1, n\}, \{n, 1\}\}$. Nous distinguons deux cas :

- Cas 1 : si $n = 2k + 1$, on peut prendre le sous-graphe cyclique,

$$\{\{1, 3\}, \{3, 5\}, \dots, \{2k-1, 2k+1\}, \{2k+1, 2\}, \{2, 4\}, \dots, \{2k, 1\}\},$$

illustré par des lignes continues dans la figure 3.2 dans le cas $n = 7$.

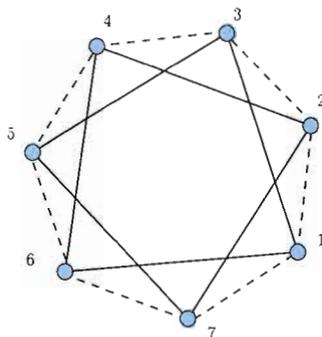


Figure 3.2 $C_7 \tilde{\subseteq} K_7 \setminus C_7$

• Cas 2 : si $n = 2k$, on peut prendre le sous-graphe cyclique,

$$\{\{1, 3\}, \{3, 5\}, \dots, \{2k-3, 2k-1\}, \{2k-1, 2\}, \{2, 2k\}, \{2k, 2(k-1)\}, \dots, \{6, 4\}, \{4, 1\}\},$$

illustré par des lignes continues dans la figure 3.3 dans le cas $n = 8$.

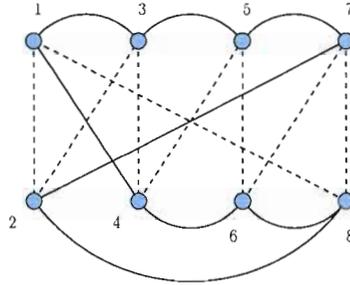


Figure 3.3 $C_8 \subseteq K_8 \setminus C_8$

■

Proposition 14 Soient g et h deux graphes 2-connexes.

$$\text{Si } h \subseteq g \text{ et } w_{RH}(h) = 0 \text{ alors } w_{RH}(g) = 0. \quad (3.21)$$

Preuve. Sans perte de généralité, on peut supposer que h est un sous-graphe de g où l'ensemble de sommets de h est $[m]$ et celui de g est $[n]$. Par hypothèse $w_{RH}(h) = 0$. Cela signifie que le système S_h d'inéquations

$$\begin{aligned} |x_i - x_j| < 1 & \text{ pour } \{i, j\} \in h \\ \text{et } |x_i - x_j| > 1 & \text{ pour } \{i, j\} \in K_m \setminus h \end{aligned}$$

est contradictoire. Considérons maintenant le système S_g ,

$$\begin{aligned} |x_i - x_j| < 1 & \text{ pour } \{i, j\} \in g \\ \text{et } |x_i - x_j| > 1 & \text{ pour } \{i, j\} \in K_n \setminus g. \end{aligned}$$

Par le lemme 4, le système S_g a plus de contraintes “<” et plus de contraintes “>” que S_h . Ainsi, S_g doit être également contradictoire. Ainsi $w_{RH}(g) = 0$. ■

3.2.1 Conditions assurant la nullité du poids de Ree-Hoover

Théorème 1 *Soit g un graphe 2-connexe de taille n . Si g satisfait l'une des conditions suivantes, alors son poids de Ree-Hoover est nul :*

$$C_k \overline{\subseteq} g, \quad k \geq 4, \quad (3.22)$$

$$S_3 \overline{\subseteq} g. \quad (3.23)$$

Preuve.

- Pour prouver l'équation (3.22) il est suffisant, par la proposition 14, de montrer que $w_{RH}(C_k) = 0$, pour $k \geq 4$, où C_k est le cycle standard $\{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \dots, \{k-1, k\}, \{1, k\}\}$. Cela signifie que, le système d'inégalités associé est contradictoire. On peut toujours supposer que pour tous $x_i \neq x_j$ pour tous i et j . Sans perte de généralité, on peut supposer que $x_1 < x_2$. Alors $x_2 < x_3$ puisque $|x_1 - x_2| \leq 1$, $|x_2 - x_3| \leq 1$ et $|x_1 - x_3| \geq 1$. Pour la même raison $x_i < x_{i+1}$ pour tout $i = 1, \dots, k$, avec la convention $x_{k+1} = x_1$. Alors on obtient $x_1 \leq x_2 < x_3 < \dots < x_k < x_1$ ce qui est une contradiction.
- Pour prouver l'équation (3.23) il est suffisant, par la proposition 14, de montrer que $w_{RH}(S_3) = 0$, où $S_3 = \{\{1, 4\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}\}$. Sans perte de généralité, on peut supposer que $x_4 = 0$, $x_1 \leq x_2 \leq x_3$. Puisque $|x_i| = |x_i - x_4| < 1$, pour $i = 1 \dots 3$, on a $|x_3 - x_2| < 2$. Cela est incompatible avec les conditions $|x_1 - x_2| > 1$, $|x_2 - x_3| > 1$, puisque $|x_3 - x_1| = (x_3 - x_2) + (x_2 - x_1) > 2$.

■

3.3 Le polynôme d'Ehrhart

La formule

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\{i,j\} \in c} \chi(|x_i - x_j| < 1) dx_1 \dots dx_{n-1}, \quad x_n = 0, \quad (3.24)$$

montre que le poids de Mayer d'un graphe connexe est, au signe près, égal au volume du polytope convexe à $n - 1$ dimensions $\mathcal{P}(c)$ délimité par les contraintes $|x_i - x_j| \leq 1$, pour $\{i, j\} \in c$, avec $x_n = 0$:

$$\mathcal{P}(c) = \{X \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \leq 1 \forall \{i, j\} \in c\} \subseteq \mathbb{R}^{n-1} \times \{0\} \subseteq \mathbb{R}^n, \quad (3.25)$$

où $X = (x_1, \dots, x_n)$. Plus précisément

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \text{Vol}(\mathcal{P}(c)), \quad (3.26)$$

où $\text{Vol}(K)$ désigne l'hypervolume $n - 1$ dimensionnel d'un ensemble $K \subseteq \mathbb{R}^{n-1} \times \{0\} \subseteq \mathbb{R}^n$. Voici un exemple illustrant l'équation (3.26).

Exemple. Considérons le graphe complet $c = K_3$, dont le polytope associé $\mathcal{P}(c)$ est un polygone illustré par la figure 3.4.

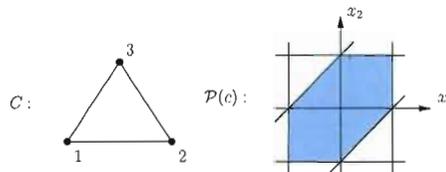


Figure 3.4 Le graphe complet $c = K_3$ et son polytope associé $\mathcal{P}(c)$

Donc

$$w_M(K_3) = (-1)^3 \text{Vol}(\mathcal{P}(c)) = -3. \quad (3.27)$$

Notre premier outil de calcul du volume des polytopes $\mathcal{P}(c)$ fait appel au théorème d'Ehrhart.

Théorème 2 (Ehrhart, voir (Stanley, 1997)). *Soit \mathcal{P} un polytope convexe de dimension d dans \mathbb{R}^m dont les sommets sont à coordonnées entières. Soit $k\mathcal{P} = \{k\alpha : \alpha \in \mathcal{P}\}$ le polytope dilaté k fois et $I(\mathcal{P}, k)$, le nombre de points à coordonnées entières dans $k\mathcal{P}$. Alors $I(\mathcal{P}, k)$ est un polynôme en k de degré d dont le coefficient dominant est le volume $\text{Vol}(\mathcal{P})$ de \mathcal{P} .*

Puisque le théorème d'Ehrhart s'applique au cas des polytopes dont les sommets sont à coordonnées entières, il faut d'abord s'assurer que le polytope $\mathcal{P}(c)$ satisfait bien cette condition. C'est le contenu du résultat suivant tiré de (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007).

Proposition 15 *Soit c un graphe connexe sur l'ensemble de sommets $\{1, 2, \dots, n\}$ et le polytope convexe $\mathcal{P}(c) \subset \mathbb{R}^n$ défini par*

$$\mathcal{P}(c) = \{X \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \leq 1 \forall \{i, j\} \in c\}, \quad (3.28)$$

où $X = (x_1, \dots, x_n)$. Alors les sommets de $\mathcal{P}(c)$ sont à coordonnées entières.

Étant donné qu'un polynôme de degré d est déterminé de façon unique par ses valeurs en $d + 1$ points distincts, le polynôme d'Ehrhart sera déterminé par les valeurs $I(\mathcal{P}, k)$ pour $k = 0, 1, \dots, d$. Le polynôme d'Ehrhart peut donc être déterminé, par exemple, par la formule d'interpolation de Newton appliqué à la table 3.1 de valeurs.

k	$\#(k \cdot \mathcal{P}(c) \cap \mathbb{Z}^d)$
0	y_0
1	y_1
2	y_2
\vdots	\vdots
d	y_d

Tableau 3.1 Cardinalité de $(k \cdot \mathcal{P}(c) \cap \mathbb{Z}^d)$, $0 \leq k \leq d$.

où $y_k = I(\mathcal{P}, k) = \#(k \cdot \mathcal{P}(c) \cap \mathbb{Z}^d)$ = nombre de points à coordonnées entières dans le polytope dilaté $k\mathcal{P}$.

Cette formule produit le polynôme suivant :

$$I(\mathcal{P}, k) = y_0 + (\Delta y_0) \binom{k}{1} + (\Delta^2 y_0) \binom{k}{2} + \dots + (\Delta^d y_0) \binom{k}{d}, \quad (3.29)$$

où

$$\begin{aligned}\Delta y_0 &= y_1 - y_0, \\ \Delta^2 y_0 &= \Delta(\Delta y_0) = \Delta y_1 - \Delta y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0 \\ &\vdots \\ \Delta^{\nu+1} y_0 &= \Delta(\Delta^\nu y_0) \\ &\vdots\end{aligned}$$

et

$$\binom{k}{i} = \frac{1}{i!} k(k-1) \dots (k-i+1).$$

Le volume $\text{Vol}(\mathcal{P}(c))$ de $\mathcal{P}(c)$ est alors donné par le coefficient dominant du polynôme $I(\mathcal{P}, k)$.

Voici un exemple simple d'application du théorème d'Ehrhart à partir de l'exemple précédent.

Exemple. Puisque $c = K_3$, alors $d = 2$. La figure 3.5 illustre les trois dilatés, $0 \cdot \mathcal{P}(c)$, $1 \cdot \mathcal{P}(c)$, $2 \cdot \mathcal{P}(c)$, du polytope $\mathcal{P}(c)$.

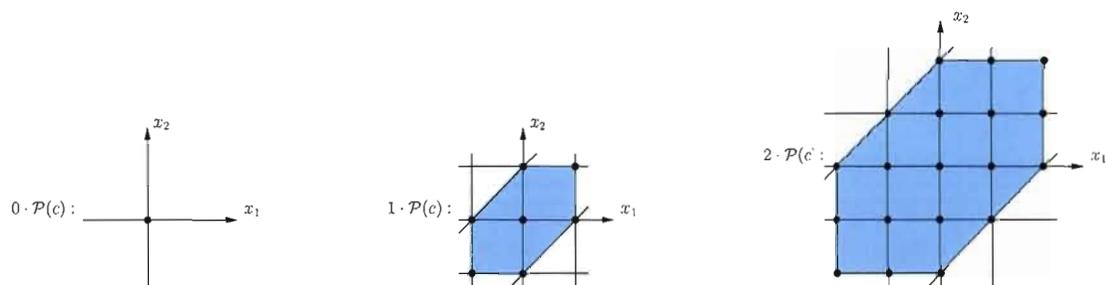


Figure 3.5 Les trois dilatés, $0 \cdot \mathcal{P}(c)$, $1 \cdot \mathcal{P}(c)$, $2 \cdot \mathcal{P}(c)$, du polytope $\mathcal{P}(c)$

En comptant le nombre de points à coordonnées entières, on obtient la table 3.2.

k	$\#(k \cdot \mathcal{P}(c) \cap \mathbb{Z}^2)$
0	1
1	7
2	19

Tableau 3.2 Cardinalité de $(k \cdot \mathcal{P}(c) \cap \mathbb{Z}^2)$, $k = 0, 1, 2$.

Puisque $y_0 = 1$, $\Delta y_0 = 7 - 1 = 6$, et $\Delta^2 y_0 = 19 - 2 \cdot 7 + 1 = 6$, on obtient

$$\begin{aligned} I(\mathcal{P}, k) &= 1 + 6 \binom{k}{1} + 6 \binom{k}{2} \\ &= 3k^2 + 3k + 1. \end{aligned}$$

Puisque le coefficient dominant de ce polynôme est 3, le volume de $\mathcal{P}(c)$ est alors 3. Ce qui est conforme à l'exemple précédent. Etant donné que le poids de Ree-Hoover d'un graphe 2-connexe b est une combinaison linéaire des poids de Mayer des surgraphes de b , nous avons aussi utilisé le théorème d'Ehrhart pour calculer le poids de Ree-Hoover. Le théorème 2 nous a permis de calculer les poids de Mayer et de Ree-Hoover des graphes 2-connexes possédant au plus 8 sommets. Pour chacun de ces graphes, nous avons aussi calculé divers paramètres. Ainsi, en plus du volume du polytope de Mayer et de ceux de Ree-Hoover, nous avons calculé le polynôme d'Ehrhart $I(\mathcal{P}, k)$ sous deux formes (en base des puissances de n et en base des coefficients binomiaux), le nombre d'arbres couvrants, le nombre d'étiquetages et le star content. Nous avons développé des procédures Maple pour effectuer tous ces calculs. Les procédures sont présentées en appendice B. Elles permettent de calculer en un temps raisonnable les poids de Mayer et de Ree-Hoover de n'importe quel graphe jusqu'à la taille 13.

La table de l'appendice A contient tous les graphes 2-connexes de taille au plus 7, ainsi que leurs poids de Mayer et de Ree-Hoover, leur star content et leurs nombres d'étiquetages. L'extension de cette table pour la taille 8 contient 7123 graphes et est disponible en version électronique (voir (Kaouche et Leroux, 2007c)). Deux autres tables pour les tailles 7 et 8 incluant d'autres paramètres

sont aussi disponibles en version électronique, voir (Kaouche et Leroux, 2007a; Kaouche et Leroux, 2007b). Ces dernières tables constituent une extension de la table jusqu'à la taille 6, présentée dans (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007).

3.4 La méthode des homomorphismes de graphes

Comme déjà observé par Bodo Lass (Lass, 2005), voir aussi (Bernardi, 2008), il est possible d'évaluer le volume du polytope $\mathcal{P}(c)$ en le décomposant en un certain nombre $\nu(c)$ de sous-polytopes qui sont tous des simplexes ayant le volume $1/(n-1)!$. Chaque sous-polytope est obtenu en fixant la partie entière et les positions relatives des parties fractionnaires des coordonnées x_1, \dots, x_n des points $X \in \mathcal{P}(c)$. Le nombre de telles configurations donnera alors $\nu(c)$ et nous aurons $\text{Vol}(\mathcal{P}(c)) = \nu(c)/(n-1)!$. Afin de rendre cette correspondance plus précise, nous considérons la représentation suivante, dite "fractionnaire", des nombres réels

$$\mathbb{R} \rightarrow ([0, 1] \times \mathbb{Z}) : x \mapsto (\xi_x, h_x), \quad (3.30)$$

où $h_x = \lfloor x \rfloor$ est la partie entière de x et $\xi_x = x - h_x$ est la partie fractionnaire (positive) de x . On a alors $x = \xi_x + h_x$ (voir figure 3.6).

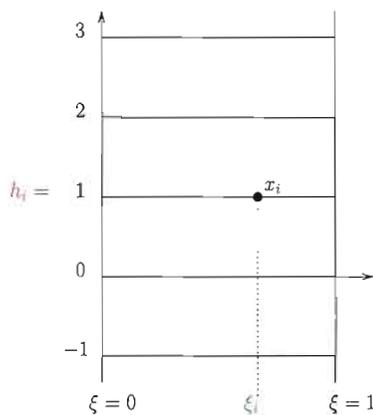


Figure 3.6 Représentation fractionnaire du nombre x_i

Par exemple, pour les nombres 0.25, 3.75, -1.25 on a

$$0.25 \mapsto (0.25, 0), \quad 3.75 \mapsto (0.75, 3) \quad \text{et} \quad -1.25 \mapsto (0.75, -2),$$

(voir figure 3.8). Notons que $0 \leq \xi_x < 1$. Cependant, pour $x = 0$, on prend par convention la représentation spéciale $0 \mapsto (1.0, -1)$, comme si 0 était infinitésimal négatif. Dans cette représentation, la condition $|x - y| < 1$ (qui nous intéresse dans le cas du poids de Mayer) pour deux nombres réels x et y se traduit en

“si $\xi_x \neq \xi_y$ et supposant $\xi_x < \xi_y$, alors $h_x = h_y$ ou $h_x = h_y + 1$ ”

(voir figure 3.7).

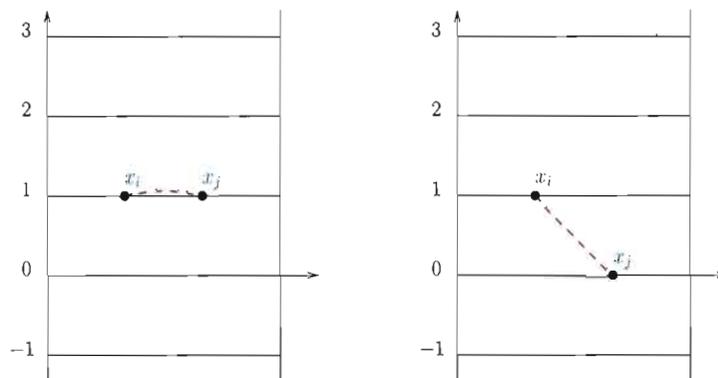


Figure 3.7 $|\xi_i - \xi_j| < 1$

Ceci peut être visualisé comme suit : x et y doivent être au même niveau ou sur deux niveaux qui se suivent, de sorte que la pente du segment entre x et y doit être nulle ou négative ; voir figure 3.8 où l’intervalle $(x - 1, x + 1)$ est représenté par les segments épais.

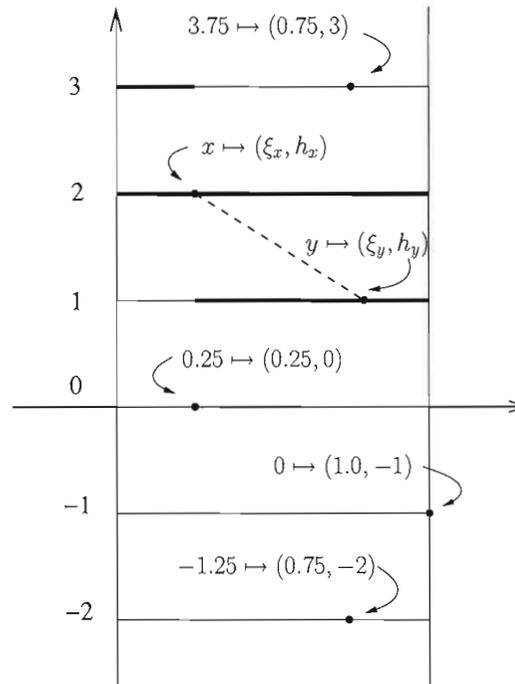


Figure 3.8 Représentation fractionnaire des nombres réels

Considérons maintenant un graphe connexe c dont l'ensemble des sommets est $V = [n] = \{1, 2, \dots, n\}$, et soit $X = (x_1, \dots, x_n)$ un point du polytope $\mathcal{P}(c)$. Écrivons $x_i \mapsto (\xi_i, h_i)$ pour la représentation fractionnaire des coordonnées x_i de X , $i = 1, \dots, n$. Rappelons que si $x_n = 0$ alors $\xi_n = 1.0$ et $h_n = -1$, selon notre convention. Le volume de $\mathcal{P}(c)$ est inchangé en enlevant tous les hyperplans $\{x_i - x_j = k\}$, pour $k \in \mathbb{Z}$. Par conséquent, nous pouvons supposer que toutes les parties fractionnaires ξ_i sont distinctes. On forme un sous-polytope de $\mathcal{P}(c)$ en gardant les "hauteurs" h_1, h_2, \dots, h_n fixes aussi bien que les positions relatives (ordre total) des parties fractionnaires $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$. Soit $h : V \rightarrow \mathbb{Z}$ la fonction de hauteur $i \mapsto h_i$ et soit $\beta : V \rightarrow [n]$ la permutation de $[n]$ tel que $\beta(i)$ donne le rang de ξ_i dans cet ordre total. Notons que $\beta(n) = n$. Par exemple, si $n = 5$ et $\xi_3 < \xi_4 < \xi_2 < \xi_1 < \xi_5$, alors $\beta(1) = 4$, $\beta(2) = 3$, $\beta(3) = 1$, $\beta(4) = 2$ et $\beta(5) = 5$, i.e. $\beta = (4, 3, 1, 2, 5)$. Le sous-polytope correspondant sera noté $\mathcal{P}(h, \beta)$. Choisissons un point canonique $X = X_{h, \beta}$ de $\mathcal{P}(h, \beta)$, par exemple, le *centre de gravité*, obtenu en posant

$\xi_i = \beta(i)/n, i = 1, \dots, n$. En utilisant les coordonnées pour représenter ce point canonique $X_{h,\beta}$ de $\mathcal{P}(h,\beta)$, et en traçant un segment pointillé entre x_i et x_j pour chaque arête $\{i, j\}$ du graphe c , on obtient une configuration dans le plan qui peut être vue comme une image homomorphe de c et qui caractérise le sous-polytope $\mathcal{P}(h,\beta)$. Par exemple, avec $n = 5$ et $c = C_5$, le 5-cycle, on peut prendre $h = (0, 1, 1, 0, -1)$ et $\beta = (4, 3, 1, 2, 5)$ comme ci-dessus. Ceci définit en effet un sous-polytope $\mathcal{P}(h,\beta)$ de $\mathcal{P}(C_5)$, pour lequel $X_{h,\beta} = (0.8, 1.6, 1.2, 0.4, 0)$. La figure 3.9 illustre la configuration correspondante, où l'image homomorphe de C_5 apparaît clairement.

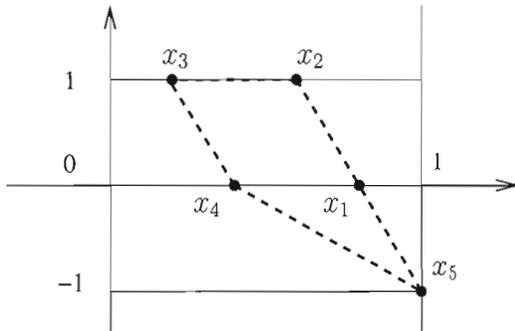


Figure 3.9 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}(C_5)$

Un exemple plus complexe est donné par la figure 3.10.

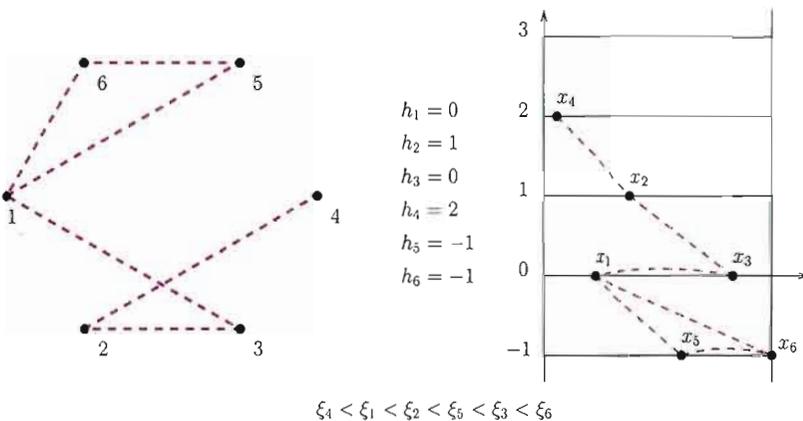


Figure 3.10 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope d'un graphe c

La figure 3.11 illustre la décomposition du polytope $\mathcal{P}(c)$ dans le cas du graphe $c = K_3$. On remarque que les 6 polytopes ont tous le même volume. Ce phénomène est vrai en général comme le montre la proposition suivante :

Proposition 16 *Soit c un graphe connexe et soit (h, β) tels que $\beta(n) = n$ et que la condition (3.32) est satisfaite. Alors, le volume du sous-polytope associé $\mathcal{P}(h, \beta)$ est égal à $1/(n-1)!$. De plus le centre de gravité de $\mathcal{P}(h, \beta)$ est donné par*

$$\left(h_1 + \frac{\beta(1)}{n}, h_2 + \frac{\beta(2)}{n}, \dots, h_{n-1} + \frac{\beta(n-1)}{n}, 0 \right). \quad (3.31)$$

Preuve. Les sous-polytopes $\mathcal{P}(h, \beta)$ de la subdivision de $\mathcal{P}(c)$ sont des simplexes tous isomorphes au simplexe standard $\mathcal{P}(0, \text{id}) = \{(x_1, \dots, x_{n-1}, 0) \in \mathbb{R}^n \mid 0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < 1\}$. En effet, la transformation $T_{h, \beta}$ qui permet de passer de $\mathcal{P}(0, \text{id})$ à $\mathcal{P}(h, \beta)$ est donnée par la formule

$$T_{h, \beta} : (x_1, \dots, x_{n-1}, 0) \rightarrow (h_1 + x_{\beta(1)}, h_2 + x_{\beta(2)}, \dots, h_{n-1} + x_{\beta(n-1)}, 0) = (u_1, \dots, u_{n-1}, 0).$$

Le jacobien associé à cette transformation est égal à 1 ou -1 . On en déduit, par la formule de changement de variables que

$$\begin{aligned} |\text{Vol}(\mathcal{P}(h, \beta))| &= \left| \int_{\mathcal{P}(h, \beta)} 1 \, du_1 \cdots du_{n-1} \right| \\ &= \left| \int_{\mathcal{P}(0, \text{id})} \left(\frac{\delta(u_1, \dots, u_{n-1})}{\delta(x_1, \dots, x_{n-1})} \right) dx_1 \cdots dx_{n-1} \right| \\ &= \left| \int_{\mathcal{P}(0, \text{id})} \pm 1 \, dx_1 \cdots dx_{n-1} \right| \\ &= |\text{Vol}(\mathcal{P}(0, \text{id}))|. \end{aligned}$$

Ce qui signifie que les polytopes $\mathcal{P}(h, \beta)$ ont tous le même volume. Ce volume commun est donc égal à $1/(n-1)!$ puisque le simplexe standard a comme volume $1/(n-1)!$.

De plus, puisque la transformation $T_{h, \beta}$ est affine et bijective, les centres de gravité de $\mathcal{P}(0, \text{id})$ et $\mathcal{P}(h, \beta)$ se correspondent par $T_{h, \beta}$. Le centre de gravité de $\mathcal{P}(h, \beta)$ est donc donné par

$$\left(h_1 + \frac{\beta(1)}{n}, h_2 + \frac{\beta(2)}{n}, \dots, h_{n-1} + \frac{\beta(n-1)}{n}, 0 \right) = T_{h, \beta} \left(\frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \dots, \frac{n-1}{n}, 0 \right),$$

puisque $(\frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \dots, \frac{n-1}{n}, 0)$ est le centre de gravité de $\mathcal{P}(0, \text{id})$. ■

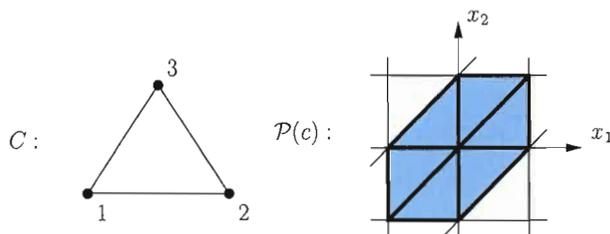


Figure 3.11 La décomposition du polytope $\mathcal{P}(K_3)$

Proposition 17 (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007). *Soit c un graphe connexe sur l'ensemble de sommets $V = [n]$ et considérons la fonction $h : V \rightarrow \mathbb{Z}$ et la bijection $\beta : V \rightarrow [n]$ satisfaisant $\beta(n) = n$. Alors la paire (h, β) détermine un sous-polytope valide $\mathcal{P}(h, \beta)$ de $\mathcal{P}(c)$ si et seulement si la condition suivante est satisfaite :*

$$\text{pour toute arête } \{i, j\} \text{ de } c, \beta(i) < \beta(j) \text{ implique } h_i = h_j \text{ ou } h_i = h_j + 1. \quad (3.32)$$

Preuve. Soit $X_{h,\beta} = (x_1, \dots, x_n)$ le point canonique associé à (h, β) , c'est-à-dire où $x_i = h_i + \xi_i$, avec $\xi_i := \beta(i)/n, i = 1, \dots, n$. Alors, la paire (h, β) détermine un sous-polytope valide $\mathcal{P}(h, \beta)$ de $\mathcal{P}(c)$ si et seulement si le point $X_{h,\beta}$ est dans $\mathcal{P}(c)$. Mais la condition (3.32) exprime exactement que $|x_i - x_j| < 1$, pour toutes les paires $\{i, j\}$ qui sont des arêtes de c , c'est-à-dire, la condition de définition de $\mathcal{P}(c)$. ■

La figure 3.12 illustre les 6 configurations valides pour le graphe $c = K_3$ dont chacune correspond à un sous-polytope. Ainsi, $\text{Vol}(\mathcal{P}(c)) = 6 \cdot \frac{1}{2} = 3$. Dans le cas général, on a la proposition suivante :

Proposition 18 (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007). *Soit c un graphe connexe et soit $\nu(c)$ le nombre de paires (h, β) telles que la condition (3.32) est satisfaite. Alors le volume du polytope $\mathcal{P}(c)$ défini par (3.28) est donné par*

$$\text{Vol}(\mathcal{P}(c)) = \nu(c)/(n-1)!. \quad (3.33)$$

Preuve. Il est clair que le polytope $\mathcal{P}(c)$ est une réunion disjointe de tous ses sous-polytopes $\mathcal{P}(h, \beta)$ et le résultat suit de la proposition 16. ■

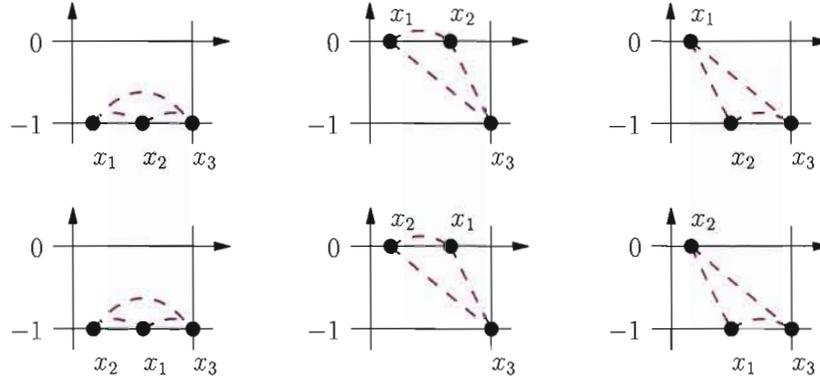


Figure 3.12 Configurations associées au graphe K_3

La proposition 18 peut être utilisée pour calculer le poids de Mayer de certaines familles de graphes, puisque $w_M(c) = (-1)^{e(c)} \text{Vol}(\mathcal{P}(c))$. Comme premier exemple on donne la preuve de la formule (3.14) : $w(K_n) = (-1)^{\binom{n}{2}} n$. En effet, puisque toutes les arêtes sont présentes dans le graphe complet, toutes les $(n-1)!$ permutations β pour lesquelles $\beta(n) = n$ peuvent être utilisées, par symétrie. De plus, il y a seulement n suites possibles de hauteur $h \circ \beta^{(-1)}$, de la forme $(0, \dots, 0, -1, \dots, -1)$, allant de $(0, \dots, 0, -1)$ à $(-1, \dots, -1)$, ce qui constitue toutes les configurations valides (h, β) . Par conséquent $\nu(K_n) = n(n-1)!$ et le résultat suit.

Proposition 19 Pour tout graphe connexe c , le polytope

$$\mathcal{P}(c) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x_n = 0 \text{ et } |x_i - x_j| \leq 1 \forall \{i, j\} \in c\}, \quad (3.34)$$

où $x = (x_1, \dots, x_n)$ est borné. Plus précisément, il est contenu dans la boule fermée, centrée à l'origine, de rayon $(n-1)^{\frac{3}{2}}$.

Preuve. Il suffit de trouver un $M < \infty$ tel que $\forall x \in \mathcal{P}(c)$, $\|x\| < M$, où $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$.

Soit donc $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{P}(c)$. Pour chaque $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$, choisissons dans le graphe

connexe c , un chemin

$$i \rightarrow i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \cdots \rightarrow i_r \rightarrow n, \quad r = r(i)$$

joignant le sommet i au sommet n . Sans perte de généralité, on peut toujours supposer que le nombre d'arêtes dans ce chemin est $\leq n - 1$. On a donc

$$\begin{aligned} |x_i| &= |(x_i - x_{i_1}) + (x_{i_1} - x_{i_2}) + \cdots + (x_{i_r} - x_n) + x_n| \\ &\leq |x_i - x_{i_1}| + |x_{i_1} - x_{i_2}| + \cdots + |x_{i_r} - x_n| + |x_n| \\ &\leq 1 + 1 + \cdots + 1 + 0 = n - 1. \end{aligned}$$

Ainsi, $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{(n-1)^2 + (n-1)^2 + \cdots + (n-1)^2 + 0^2} = (n-1)^{\frac{3}{2}}$.

Il suffit donc de prendre $M = (n-1)^{\frac{3}{2}}$. ■

Remarque 4 *Le polytope $\mathcal{P}(c)$ est symétrique par rapport à l'origine, c'est-à-dire*

$$\mathcal{P}(c) = \mathcal{P}(-c) = \{(-x_1, \dots, -x_n) \mid (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{P}(c)\}.$$

En effet,

$$\begin{aligned} (x_1, \dots, x_n) \in \mathcal{P}(c) &\Leftrightarrow x_n = 0 \quad \text{et} \quad \forall \{i, j\} \in c \quad |x_i - x_j| \leq 1 \\ &\Leftrightarrow x_n = 0 \quad \text{et} \quad \forall \{i, j\} \in c \quad |(-x_i) - (-x_j)| \leq 1 \\ &\Leftrightarrow (-x_1, \dots, -x_n) \in \mathcal{P}(c). \end{aligned}$$

Grâce à cette symétrie, le centre de gravité de $\mathcal{P}(c)$ est nécessairement à l'origine.

3.5 Méthode des homomorphismes de graphes adaptée aux poids de Ree-Hoover

Dans le cas du poids de Ree-Hoover, nous pouvons traduire la condition $|x - y| > 1$ pour deux nombres réels x et y par

“si $\xi_x \neq \xi_y$ et supposant $\xi_x < \xi_y$, alors $h_x \leq h_y - 1$ ou $h_x \geq h_y + 2$ ”.

Ceci peut être visualisé comme suit : si la différence entre les parties entières de x et de y est égale à 1 alors la pente du segment joignant x et y doit être positive, sinon la différence en valeur absolue entre les deux parties entières doit être au moins 2. Voir figure 3.13.

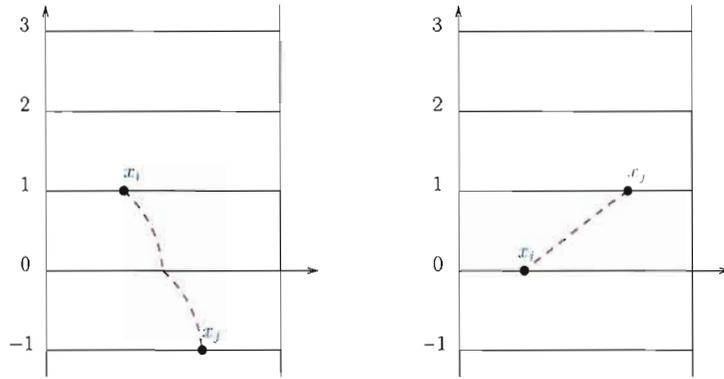


Figure 3.13 $|x_i - x_j| > 1$

Proposition 20 Soit c un graphe 2-connexe dont l'ensemble des sommets est $V = [n]$ et considérons une fonction $h : V \rightarrow \mathbb{Z}$ et une bijection $\beta : V \rightarrow [n]$ satisfaisant $\beta(n) = n$. Alors la paire (h, β) détermine un RH-sous-polytope valide $\mathcal{P}_{RH}(h, \beta)$ si et seulement si les conditions suivantes sont satisfaites :

$$\text{pour toute arête } \{i, j\} \text{ de } c, \beta(i) < \beta(j) \text{ implique } h_i = h_j \text{ ou } h_i = h_j + 1, \quad (3.35)$$

$$\text{pour toute arête } \{i, j\} \text{ de } \bar{c}, \beta(i) < \beta(j) \text{ implique } h_i \leq h_j - 1 \text{ ou } h_i \geq h_j + 2. \quad (3.36)$$

Preuve. Désignons par $\mathcal{P}_{RH}(c)$ la réunion de tous les RH-sous-polytopes valides $\mathcal{P}_{RH}(h, \beta)$. La fermeture de $\mathcal{P}_{RH}(c)$ est une réunion de polytopes. Notons par $X_{h, \beta} = (x_1, \dots, x_n)$ le point canonique associé à (h, β) , c'est-à-dire, où $x_i = h_i + \xi_i$, avec $\xi_i := \beta(i)/n, i = 1, \dots, n$. Alors la paire RH- (h, β) détermine un sous-polytope valide $\mathcal{P}_{RH}(h, \beta)$ de $\mathcal{P}_{RH}(c)$ si et seulement si le point $X_{h, \beta}$ est dans $\mathcal{P}_{RH}(c)$. Mais la condition (3.35) exprime exactement que $|x_i - x_j| < 1$, pour toutes les paires $\{i, j\}$ qui sont des arêtes de c , et la condition (3.36) exprime exactement que

$|x_i - x_j| > 1$, pour toutes les paires $\{i, j\}$ qui sont des arêtes de \bar{c} , c'est-à-dire, la condition de définition pour le domaine de l'intégration de (3.5). ■

Proposition 21 *Soit c un graphe 2-connexe et soit (h, β) tels que $\beta(n) = n$ et que les conditions (3.35) et (3.36) sont satisfaites. Alors le volume du RH-sous-polytope associé $\mathcal{P}_{RH}(h, \beta)$ est égal à $1/(n-1)!$.*

Preuve. La preuve est identique à celle de la proposition 16 et est laissée au lecteur. ■

Proposition 22 *Soit c un graphe 2-connexe et soit $\nu_{RH}(c)$ le nombre de paires (h, β) telles que les conditions (3.35) et (3.36) sont satisfaites. Alors le volume de $\mathcal{P}_{RH}(c)$ est donné par*

$$\text{Vol}(\mathcal{P}_{RH}(c)) = \nu_{RH}(c)/(n-1)!. \quad (3.37)$$

Preuve. Il est clair que le polytope $\mathcal{P}_{RH}(c)$ est une réunion disjointe de tous ses sous-polytopes $\mathcal{P}_{RH}(h, \beta)$ et le résultat suit de la proposition 21. ■

La proposition 22 peut être utilisée pour calculer le poids de Ree-Hoover de certaines familles de graphes, puisque $w_{RH}(c) = (-1)^{e(c)} \text{Vol}(\mathcal{P}_{RH}(c))$.

3.6 La méthode de Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo permet d'estimer la valeur d'intégrales à partir de méthodes probabilistes. Si

$$f : [a_1, b_1] \times \cdots \times [a_k, b_k] \rightarrow \mathbb{R},$$

est une fonction de densité de probabilités, alors la méthode consiste à remplacer la valeur de l'intégrale

$$\int_{a_k}^{b_k} \cdots \int_{a_1}^{b_1} g(x_1, \cdots, x_k) f(x_1, \cdots, x_k) dx_1 \cdots dx_k \quad (3.38)$$

par la valeur de la somme finie

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_1^{(i)}, \cdots, x_k^{(i)}), \quad (3.39)$$

où $(x_1^{(i)}, \dots, x_k^{(i)})$ sont des points de $[a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k]$ pris aléatoirement selon la loi de densité f . Plus N est grand, plus la somme (3.39) estimera bien l'intégrale (3.38) avec un estimé probabiliste d'erreur de plus en plus petit. Dans le cas qui nous intéresse, on veut calculer $\text{Vol}(\mathcal{P}(c))$ où c est un graphe connexe. Puisque le polytope $\mathcal{P}(c) \subseteq \mathbb{R}^{n-1}$ est borné il suffit de trouver un pavé de la forme $[a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k]$, $k = n - 1$, tel que $\mathcal{P}(c) \subseteq [a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k]$ et de prendre la densité uniforme de probabilité

$$\begin{aligned} f(x_1, \dots, x_k) &= \frac{1}{\text{Vol}([a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k])} \\ &= \frac{1}{(b_1 - a_1)(b_2 - a_2) \dots (b_k - a_k)} \end{aligned} \quad (3.40)$$

pour tout $(x_1, \dots, x_k) \in [a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k]$ et choisir

$$g(x_1, \dots, x_k) = \chi((x_1, \dots, x_k) \in \mathcal{P}(c)) = \begin{cases} 1, & \text{si } (x_1, \dots, x_k) \in \mathcal{P}(c), \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

On aura alors

$$\begin{aligned} & \int_{a_k}^{b_k} \dots \int_{a_1}^{b_1} g(x_1, \dots, x_k) f(x_1, \dots, x_k) dx_1 \dots dx_k \\ &= \int_{a_k}^{b_k} \dots \int_{a_1}^{b_1} \chi((x_1, \dots, x_k) \in \mathcal{P}(c)) \cdot \frac{1}{\text{Vol}([a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k])} dx_1 \dots dx_k \\ &= \frac{1}{\text{Vol}([a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k])} \int_{\mathcal{P}(c)} dx_1 \dots dx_k \\ &= \frac{\text{Vol}(\mathcal{P}(c))}{\text{Vol}([a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k])} \\ &\simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_1^{(i)}, \dots, x_k^{(i)}), \end{aligned} \quad (3.41)$$

où les points $(x_1^{(i)}, \dots, x_k^{(i)})$ sont pris aléatoirement dans $[a_1, b_1] \times \dots \times [a_k, b_k]$ selon une distribution uniforme. En d'autres termes,

$$\frac{\text{Vol}(\mathcal{P}(c))}{(b_1 - a_1)(b_2 - a_2) \dots (b_k - a_k)} \simeq \Phi \in \mathcal{P}(c), \quad (3.42)$$

où Φ est la variable aléatoire “fraction des N points $(x_1^{(i)}, \dots, x_k^{(i)})$ qui appartiennent au polytope $\mathcal{P}(c)$ ”. Finalement, le volume de $\mathcal{P}(c)$ est estimé par

$$\text{Vol}(\mathcal{P}(c)) \simeq (b_1 - a_1)(b_2 - a_2) \cdots (b_k - a_k) \cdot \Phi. \quad (3.43)$$

Il suffit donc de trouver des intervalles $[a_1, b_1], \dots, [a_k, b_k]$ tels que

$$\mathcal{P}(c) \subseteq [a_1, b_1] \times \cdots \times [a_k, b_k].$$

La preuve que nous avons donnée de la proposition 19 pour montrer que $\mathcal{P}(c)$ est borné nous donne un estimé trop grossier pour ces intervalles. Un changement de variables nous permettra de choisir le pavé fixe

$$[-1, 1] \times \cdots \times [-1, 1] = [-1, 1]^k$$

dont le volume est 2^k . Ce changement de variables s’effectue comme suit :

- 1) Choisissons d’abord une arborescence couvrante a du graphe c enracinée au sommet n .
- 2) Renumerotons bijectivement les sommets de l’arborescence couvrante en remplaçant n par 0 et les sommets restants par les nombres $\{1, 2, \dots, k\}$, $k = n - 1$, de sorte que l’arborescence a devienne croissante à partir de la racine en orientant ses arêtes vers la racine. On a donc

$$i \leftarrow j \Leftrightarrow i < j, \quad (\text{voir figure 6.1}). \quad (3.44)$$

- 3) L’ensemble $c \setminus a$ des arêtes de c complémentaires à a sont elles aussi orientées canoniquement avec la même convention (3.44).

- 4) Considérons la fonction

$$\alpha : \{1, 2, \dots, k\} \rightarrow \{0, 1, \dots, k - 1\}, \quad (3.45)$$

définie par

$$i = \alpha(j) \Leftrightarrow i \leftarrow j \text{ dans } a. \quad (3.46)$$

- 5) Introduisons les nouvelles variables

$$u_j = x_j - x_{\alpha(j)}, \quad j = 1, \dots, k. \quad (3.47)$$

On a évidemment $|u_j| \leq 1$, $j = 1, \dots, k$, puisque $|x_j - x_{\alpha(j)}| \leq 1$ et on peut retrouver les variables x_j on posant

$$x_j = u_j + u_{\alpha(j)} + u_{\alpha^2(j)} + \dots \quad (3.48)$$

Les contraintes supplémentaires

$$|x_j - x_i| \leq 1, \quad \{i, j\} \in c \setminus a, \quad (3.49)$$

prennent la forme

$$|(u_j + u_{\alpha(j)} + u_{\alpha^2(j)} + \dots) - (u_i + u_{\alpha(i)} + u_{\alpha^2(i)} + \dots)| \leq 1, \quad \{i, j\} \in c \setminus a. \quad (3.50)$$

La transformation

$$(x_1, \dots, x_k) \mapsto (u_1, \dots, u_k),$$

est bijective et de jacobien 1. Ainsi le polytope $\mathcal{P}(c)$ dans le système de coordonnées (x_1, \dots, x_k) correspond à un polytope $\mathcal{P}(c)^*$ dans le système de coordonnées (u_1, \dots, u_k) et

$$\text{Vol}(\mathcal{P}(c)^*) = \text{Vol}(\mathcal{P}(c)). \quad (3.51)$$

De plus,

$$\mathcal{P}(c)^* \subseteq [-1, 1]^k, \quad (3.52)$$

car

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(c)^* &= \{(u_1, \dots, u_n) \mid |u_j| \leq 1, \quad j = 1, \dots, k \text{ satisfaisant (3.50)}\} \\ &\subseteq \{(u_1, \dots, u_n) \mid |u_j| \leq 1, \quad j = 1, \dots, k\} \\ &= [-1, 1]^k. \end{aligned}$$

6) $\text{Vol}(\mathcal{P}(c))$ est alors estimé par

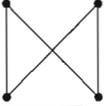
$$\text{Vol}(\mathcal{P}(c)^*) = \text{Vol}(\mathcal{P}(c)) \simeq 2^k \Phi^*, \quad (3.53)$$

où Φ^* est la fraction des points pris aléatoirement dans le pavé $[-1, 1]^k$ qui appartiennent à $\mathcal{P}(c)^*$. En ce qui concerne l'estimé du poids de Ree-Hoover, il faut ajouter les contraintes supplémentaires

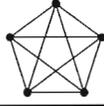
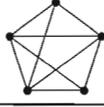
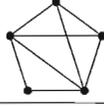
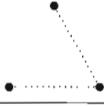
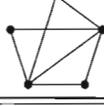
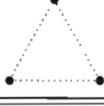
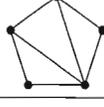
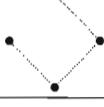
(3.36) concernant les arêtes complémentaires du graphe c par rapport au graphe complet K_n . La méthode de Monte-Carlo se généralise évidemment aux dimensions d quelconques. Les procédures de l'appendice B, section B.3, implémentent la méthode de Monte-Carlo pour le calcul des deux poids en dimension quelconque.

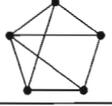
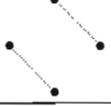
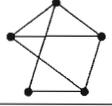
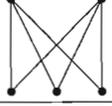
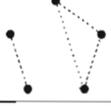
La table 3.3 suivante présente des valeurs approchées du poids de Ree-Hoover des graphes 2-connexes de taille ≤ 6 pour les dimensions 3 et 4 par la méthode de Monte-Carlo avec 100000 points aléatoires.

Avec 4 sommets :

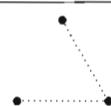
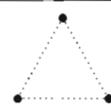
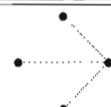
Numéro	Graphe g	Graphe \bar{g}	$w_{RH}(g), d = 2$	$w_{RH}(g), d = 3$
4.0.1		\emptyset	2.197808	1.265288
4.2.1			0.717672	0.625272
4.4.1			0.044088	0.080040

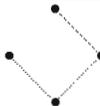
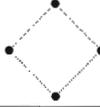
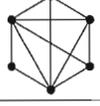
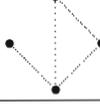
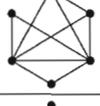
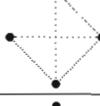
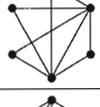
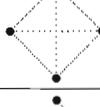
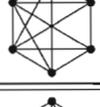
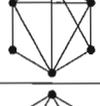
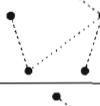
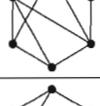
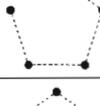
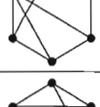
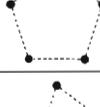
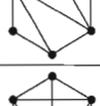
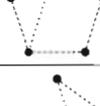
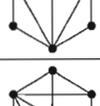
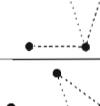
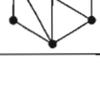
Avec 5 sommets :

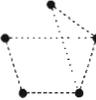
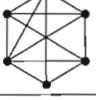
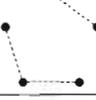
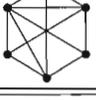
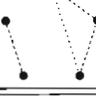
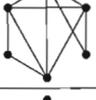
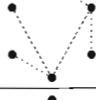
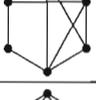
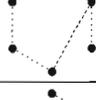
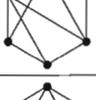
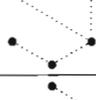
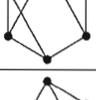
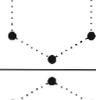
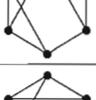
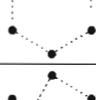
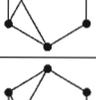
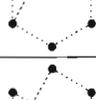
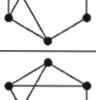
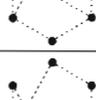
Numéro	Graphe g	Graphe \bar{g}	$w_{RH}(g), d = 2$	$w_{RH}(g), d = 3$
5.0.1		\emptyset	1.803728	0.709984
5.2.1			0.348608	0.201392
5.3.1			0.300704	0.212384
5.3.2			0.067792	0.091632
5.4.1			0.138784	0.139184

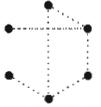
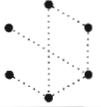
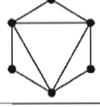
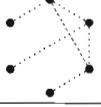
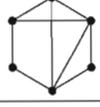
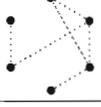
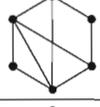
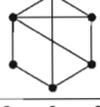
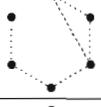
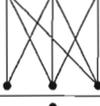
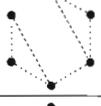
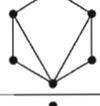
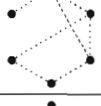
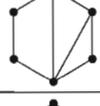
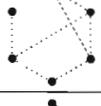
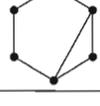
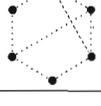
5.4.2			0.017936	0.020768
5.5.1			0.015680	0.027280
5.5.2			0.021360	0.042528
5.5.3			0.005024	0.008000
5.5.4			0.000000	0.000576

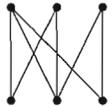
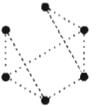
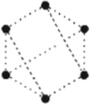
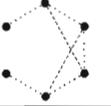
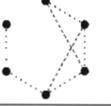
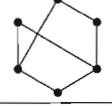
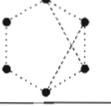
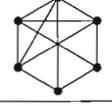
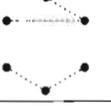
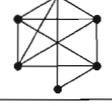
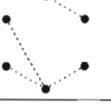
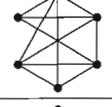
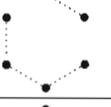
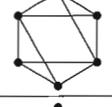
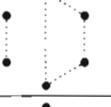
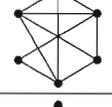
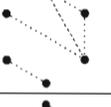
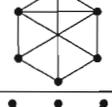
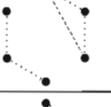
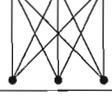
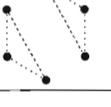
Avec 6 sommets :

Numéro	Graphe g	Graphe \bar{g}	$w_{RH}(g), d = 2$	$w_{RH}(g), d = 3$
6.0.1		\emptyset	1.373824	0.353920
6.2.1			0.181696	0.068512
6.3.1			0.107232	0.046592
6.3.2			0.013440	0.012384
6.4.1			0.132992	0.066944

6.4.2			0.033696	0.020544
6.4.3			0.090592	0.052800
6.4.4			0.017472	0.017408
6.4.5			0.014752	0.019744
6.4.6			0.000896	0.006944
6.4.7			0.007776	0.005920
6.5.1			0.037216	0.025152
6.5.2			0.003488	0.004512
6.5.3			0.004672	0.005024
6.5.4			0.044544	0.037504
6.5.5			0.015232	0.019008
6.5.6			0.001536	0.002208

6.5.7			0.014816	0.021824
6.5.8			0.006112	0.011904
6.5.9			0.001600	0.002112
6.5.10			0.000000	0.000160
6.6.1			0.094976	0.061472
6.6.2			0.002784	0.003712
6.6.3			0.001856	0.002336
6.6.4			0.000096	0.000256
6.6.5			0.000000	0.000032
6.6.6			0.001184	0.001280
6.6.7			0.003168	0.004672
6.6.8			0.000000	0.000320

6.6.9			0.005952	0.009760
6.6.10			0.044672	0.043712
6.6.11			0.001664	0.001952
6.6.12			0.006528	0.009312
6.6.13			0.013696	0.017504
6.6.14			0.000224	0.001056
6.6.15			0.001632	0.002720
6.6.16			0.000000	0.000064
6.6.17			0.000000	0.000032
6.6.18			0.004416	0.007552
6.6.19			0.004192	0.007840
6.6.20			0.007360	0.014240

6.6.21			0.000896	0.001760
6.6.22			0.011744	0.025920
6.6.23			0.000288	0.001664
6.6.24			0.000000	0.000160
6.6.25			0.000000	0.000416
6.6.26			0.000384	0.000384
6.6.27			0.000768	0.001088
6.6.28			0.000128	0.000448
6.6.29			0.000352	0.000416
6.6.30			0.000000	0.000064
6.6.31			0.000000	0.000000
6.6.32			0.000000	0.000000

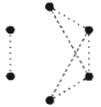
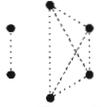
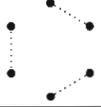
6.6.33			0.000000	0.000064
6.6.34			0.000000	0.000000
6.6.35			0.000000	0.000256

Tableau 3.3 Valeur estimée de w_{RH} des graphes 2-connexes de taille au plus 6 pour les dimensions 2 et 3 par la méthode de Monte-Carlo

Chapitre IV

QUELQUES FORMULES EXPLICITES POUR LES POIDS DE MAYER ET DE REE-HOOVER DE FAMILLES INFINIES DE GRAPHES

À partir de nos tables (voir Appendice B ainsi que la version électronique (Kaouche et Leroux, 2007c)), nous avons conjecturé diverses formules explicites pour les poids de Mayer et de Ree-Hoover de familles infinies de graphes simplement, doublement et triplement indexées par des entiers. Le but du présent chapitre est d'énoncer et de démontrer rigoureusement ces formules. Voici maintenant la composition de ce chapitre. Dans la section 4.1, nous démontrons ces formules pour le poids de Ree-Hoover, en adaptant la méthode des homomorphismes de graphes. La section 4.2 est consacrée au poids de Mayer de ces familles que nous établissons à partir des relations exprimant le poids de Mayer d'un graphe comme somme des poids de Ree-Hoover de ses surgraphes.

4.1 Poids de Ree-Hoover de certaines familles infinies de graphes

Voici nos résultats concernant des formules explicites pour le poids de Ree-Hoover de certaines familles infinies de graphes. Leurs preuves utilisent les techniques des *homomorphismes de graphes*. Les poids des graphes 2-connexes b sont indiqués en valeur absolue $|w(b)|$, le signe étant toujours égal à $(-1)^{e(b)}$.

4.1.1 Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus S_k$

Notons S_k le graphe k -étoile avec l'ensemble de sommets $[k+1]$ et l'ensemble d'arêtes $\{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \dots, \{1, k+1\}\}$. Comme premier exemple, on calcule $|w_{RH}(K_n \setminus e)|$, avec $K_n \setminus e = K_n \setminus S_1$.

Proposition 23 *Pour $n \geq 3$, notons par $K_n \setminus e$ le graphe complet ayant n sommets dont une arête arbitraire a été enlevée. Alors on a*

$$|w_{RH}(K_n \setminus e)| = \frac{2}{(n-1)}. \quad (4.1)$$

Preuve. Nous pouvons supposer que l'arête enlevée est $e = \{1, n\}$. Il y a deux possibilités pour h :

- a) soit $h_1 = 1, h_n = -1$ et tous les autres $h_i = 0$, de sorte que $\beta(1)$ doit être 1,
- b) soit $h_1 = -2$ et tous les autres $h_i = -1$, de sorte que $\beta(1)$ doit être $n-1$. Dans les deux cas, β peut être étendue de $(n-2)!$ façons, donnant les positions relatives possibles des $x_i, 2 \leq i \leq n-1$, (voir figure 4.1). Alors, il y a $2(n-2)!$ RH-configurations (h, β) .

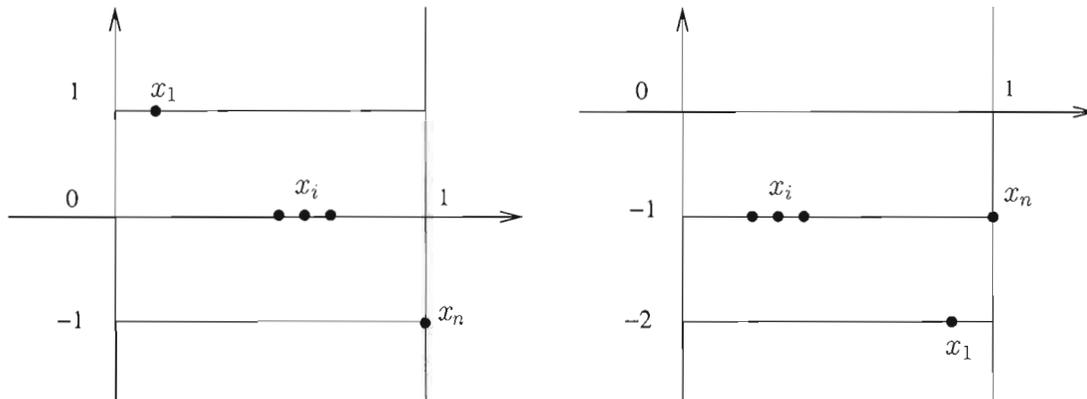


Figure 4.1 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus e)$

■

Notons que, à partir de l'équation (2.14) et le fait connu que $|w_M(K_n)| = n$, la relation (2.17) implique le résultat suivant

$$w_M(K_n \setminus e) = (-1)^{\binom{n}{2}-1} \left(n + \frac{2}{(n-1)} \right), \quad (4.2)$$

donné par Bodo Lass (Lass, 2005), puisque

$$|w_M(K_n \setminus e)| = |w_{RH}(K_n)| + |w_{RH}(K_n \setminus e)|.$$

Dans le cas général on a :

Proposition 24 *Pour $k \geq 1$, $n \geq k + 3$, on a*

$$|w_{RH}(K_n \setminus S_k)| = \frac{2k!}{(n-1)(n-2) \cdots (n-k)}. \quad (4.3)$$

Preuve. Nous pouvons supposer que les arêtes enlevées sont $\{1, n\}, \{2, n\}, \dots, \{k, n\}$ (voir figure 4.2, pour le cas de S_3).

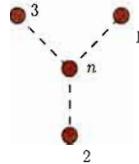


Figure 4.2 Le graphe S_3

Il y a deux possibilités pour h :

- $h_1 = h_2 = \dots = h_k = 1$ et $h_n = -1$ et tous les autres $h_i = 0$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2), \dots, \beta(k))$ doit être une permutation de $\{1, 2, \dots, k\}$,
- $h_1 = h_2 = \dots = h_k = -2$ et tous les autres $h_i = -1$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2), \dots, \beta(k))$ doit être une permutation de $\{n-1, n-2, \dots, n-k\}$.

Dans chaque cas β peut être étendue de $(n - (k + 1))!$ façons, donnant les positions relatives possibles des x_i , $k + 1 \leq i \leq n - 1$ (voir figure 4.3, pour la cas de S_3). Alors, il y a $2k!(n - k - 1)!$ RH-configurations (h, β) .

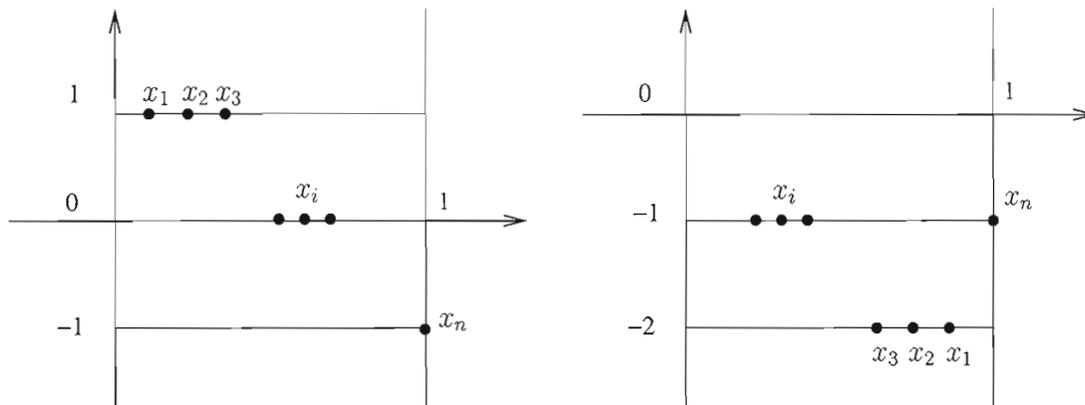


Figure 4.3 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus S_3)$

■

4.1.2 Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus (S_j - S_k)$

Soit $S_j - S_k$ le graphe obtenu en joignant par une nouvelle arête les centres d'une j -étoile et d'une k -étoile ; voir figure 4.4 pour un exemple.

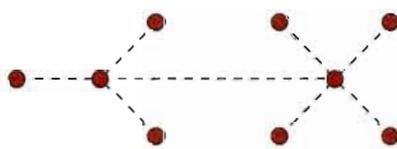


Figure 4.4 Le graphe $S_3 - S_4$

Commençons par le cas simple $S_1 - S_1$.

Proposition 25 Pour $n \geq 5$, soit $g_n = K_n \setminus S_1 - S_1$. Alors on a

$$|w_{RH}(g_n)| = \frac{2}{(n-1)(n-2)(n-3)} \tag{4.4}$$

Preuve. Nous pouvons supposer que les arêtes enlevées sont $\{1, n\}$, $\{2, n\}$ et $\{2, 3\}$ (voir figure 4.5).

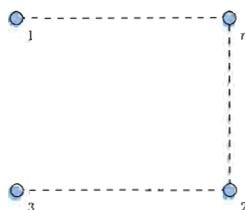


Figure 4.5 Le graphe $S_1 - S_1$

Il y a deux possibilités pour h :

- $h_1 = h_2 = 1$ et $h_n = -1$ et tous les autres $h_i = 0$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2), \beta(3))$ doit être $(1, 3, 2)$,
- $h_1 = h_2 = -2$ et tous les autres $h_i = -1$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2), \beta(3))$ doit être $(n - 1, n - 3, n - 2)$.

Dans chaque cas β peut être étendue de $(n - 4)!$ façons, donnant les positions relatives possibles des x_i , $4 \leq i \leq n - 1$ (voir figure 4.6). Alors, il y a $2(n - 4)!$ RH-configurations (h, β) .

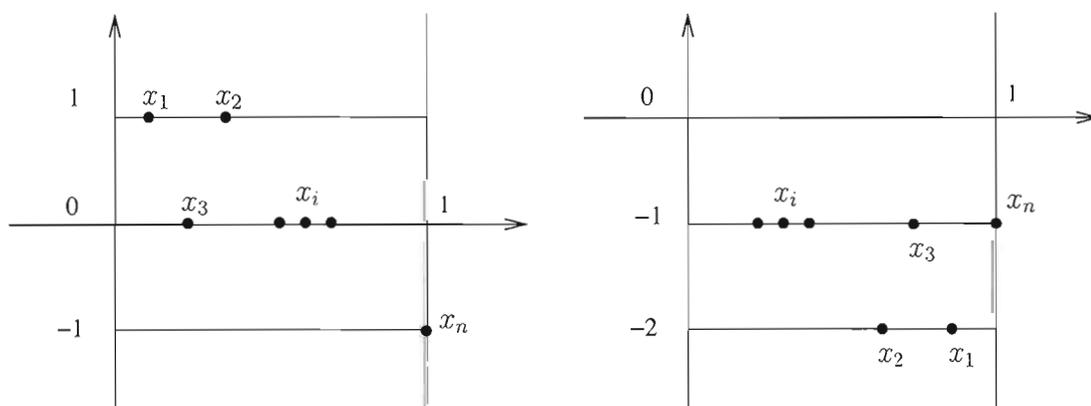


Figure 4.6 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus S_1 - S_1)$

■

Dans le cas général on a :

Proposition 26 Pour $j \geq k \geq 1$, $n \geq k + j + 3$, soit $g_n = K_n \setminus (S_j - S_k)$. Alors on a

$$|w_{RH}(g_n)| = \frac{2k!j!}{(n-1)(n-2)\cdots(n-(k+j+1))}. \quad (4.5)$$

Preuve. Nous pouvons supposer que les arêtes enlevées sont $\{1, n\}$, $\{2, n\}$, \dots , $\{k+1, n\}$ et $\{2, k+2\}$, $\{2, k+3\}$, \dots , $\{2, k+j+1\}$ (voir figure 4.7, pour le cas de $S_2 - S_3$).

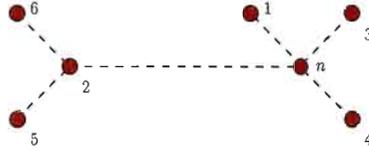


Figure 4.7 Le graphe $S_2 - S_3$

Il y a deux possibilités pour h :

- $h_1 = h_2 = \dots = h_{k+1} = 1$ et $h_n = -1$ et tous les autres $h_i = 0$, de sorte que $(\beta(1), \beta(3), \dots, \beta(k+1))$ doit être une permutation de $\{1, 2, \dots, k\}$ et $(\beta(k+2), \beta(k+3), \dots, \beta(k+j+1))$ doit être une permutation de $\{k+1, \dots, k+j\}$ et $\beta(2) = k+j+1$.
- $h_1 = h_2 = \dots = h_{k+1} = -2$ et tous les autres $h_i = -1$, de sorte que $(\beta(1), \beta(3), \dots, \beta(k+1))$ doit être une permutation de $\{n-1, n-2, \dots, n-k\}$ et $(\beta(k+2), \beta(k+3), \dots, \beta(k+j+1))$ doit être une permutation de $\{n-k-1, \dots, n-k-j\}$ et $\beta(2) = n-k-j-1$.

Dans chaque cas β peut être étendue de $(n - (k + j + 2))!$ façons, donnant les positions relatives possibles des x_i , $k + j + 2 \leq i \leq n - 1$ (voir figure 4.8, pour le cas de $S_2 - S_3$). Alors, il y a $2k!j!(n - (k + j + 2))!$ RH-configurations (h, β) .

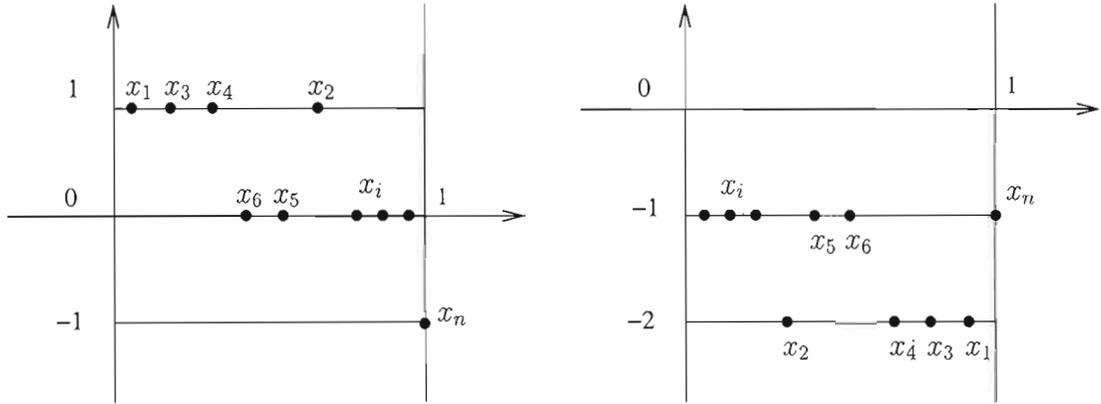


Figure 4.8 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus S_2 - S_3)$

■

4.1.3 Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus (C_4 \cdot S_k)$

Soit $C_4 \cdot S_k$ le graphe obtenu en identifiant un sommet du graphe C_4 avec le centre d'une k -étoile ; voir figure 4.9 pour un exemple.

Commençons d'abord par le cas spécial $k = 0$ qui correspond au graphe $K_n \setminus C_4$. La preuve est

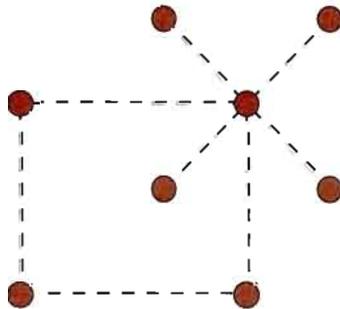


Figure 4.9 Le graphe $C_4 \cdot S_4$

différente de celle qui correspond au cas $k \geq 1$.

4.1.3.1 Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus C_4$

Proposition 27 Pour $n \geq 6$, on a

$$|w_{RH}(K_n \setminus C_4)| = \frac{8}{(n-1)(n-2)(n-3)}, \quad (4.6)$$

où C_4 est le cycle (non orienté) avec 4 sommets.

Preuve. Nous pouvons supposer que les arêtes enlevées sont $\{1, n\}$, $\{2, n\}$, $\{2, 3\}$ et $\{3, 1\}$ (voir figure 4.10).

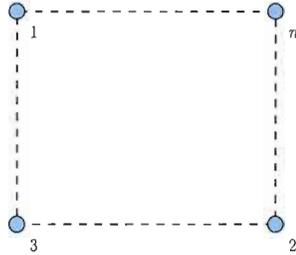


Figure 4.10 Le graphe C_4

Il y a quatre possibilités pour h :

- $h_1 = h_2 = 1$ et $h_n = -1$ et tous les autres $h_i = 0$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2))$ doit être une permutation de $\{2, 3\}$ et $\beta(3) = 1$,
- $h_1 = h_2 = 1$ et $h_n = h_3 = -1$ et tous les autres $h_i = 0$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2))$ doit être une permutation de $\{1, 2\}$ et $\beta(3) = n - 1$,
- $h_1 = h_2 = -2$ et tous les autres $h_i = -1$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2))$ doit être une permutation de $(n - 2, n - 3)$ et $\beta(3) = n - 1$,
- $h_1 = h_2 = -2$, $h_3 = 0$ et tous les autres $h_i = -1$, de sorte que $(\beta(1), \beta(2))$ doit être une permutation de $(n - 1, n - 2)$ et $\beta(3) = 1$.

Dans chaque cas β peut être étendue de $(n - 4)!$ façons, donnant les positions relatives possibles des x_i , $4 \leq i \leq n - 1$ (voir figure 4.11). Alors, il y a $4 \cdot 2!(n - 4)!$ RH-configurations (h, β) .

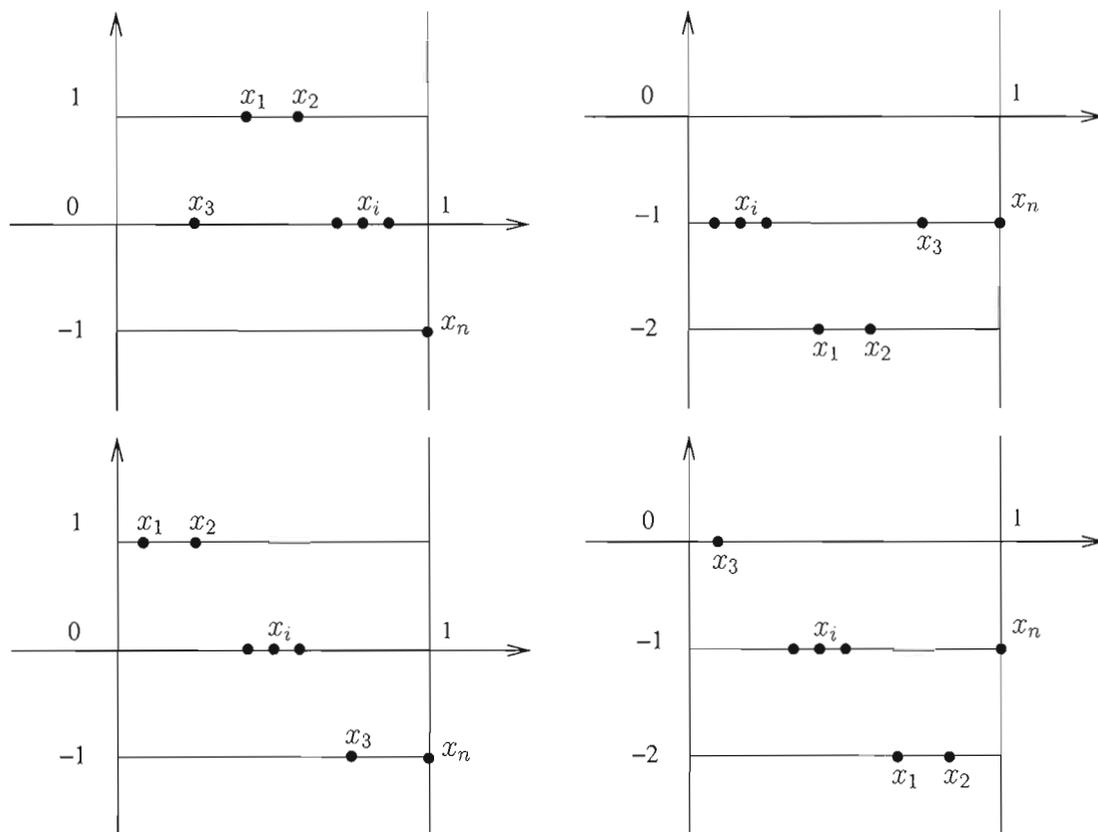


Figure 4.11 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus C_4)$

■

Proposition 28 Pour $k \geq 1$, $n \geq k + 5$, on a

$$|w_{RH}(K_n \setminus (C_4 \cdot S_k))| = \frac{4k!}{(n-1)(n-2) \cdots (n-(k+3))}. \quad (4.7)$$

Preuve. Nous pouvons supposer que les arêtes enlevées sont $\{1, n\}$, $\{2, n\}$, $\{4, n\}$, \dots , $\{k+3, n\}$ et $\{1, 3\}$, $\{2, 3\}$ (voir figure 4.12, pour le cas de $C_4 \cdot S_2$).

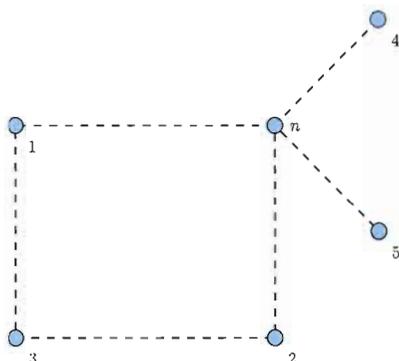


Figure 4.12 Le graphe $C_4 \cdot S_2$

Il y a deux possibilités pour h :

- $h_1 = h_2 = h_4 \cdots = h_{k+3} = 1$ et $h_n = -1$ et tous les autres $h_i = 0$, de sorte que $(\beta(4), \beta(5), \dots, \beta(k+3))$ doit être une permutation de $\{1, 2, \dots, k\}$ et $(\beta(1), \beta(2))$ doit être une permutation de $\{k+2, k+3\}$ et $\beta(3) = k+1$,
- $h_1 = h_2 = h_4 \cdots = h_{k+3} = -2$ et tous les autres $h_i = -1$, de sorte que $(\beta(4), \beta(5), \dots, \beta(k+3))$ doit être une permutation de $\{n-1, n-2, \dots, n-k\}$ et $(\beta(1), \beta(2))$ doit être une permutation de $\{n-k-2, n-k-3\}$ et $\beta(3) = n-k-1$.

Dans chaque cas β peut être étendue de $(n - (k + 4))!$ façons, donnant les positions relatives possibles des x_i , $k + 4 \leq i \leq n - 1$ (voir figure 4.13, pour le cas de $C_4 \cdot S_2$). Alors, il y a $2 \cdot 2!k!(n - (k + 4))!$ RH-configurations (h, β) .

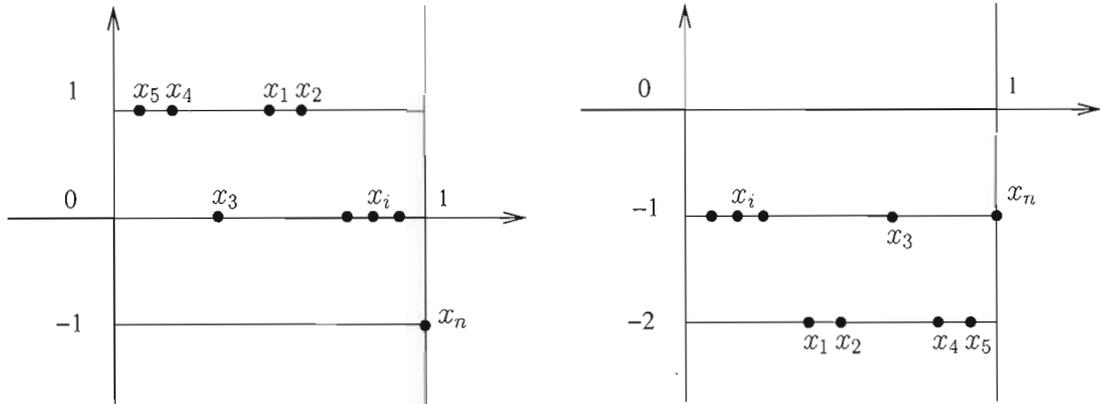


Figure 4.13 Représentation fractionnaire d'un sous-polytope de $\mathcal{P}_{RH}(K_n \setminus (C_4 \cdot S_2))$

■

Notons que la formule (4.6) n'est pas un cas spécial de (4.7).

4.1.4 Le poids de Ree-Hoover du graphe $K_n \setminus P_k$

Soit P_k la chaîne sur l'ensemble de sommets $[k]$ et l'ensemble d'arêtes $\{\{1, 2\}, \{2, 3\}, \dots, \{k-1, k\}\}$. Pour $n \geq 5$, on a $K_n \setminus P_3 = K_n \setminus S_2$ et $K_n \setminus P_4 = K_n \setminus S_1 - S_1$. Ainsi, les poids $w_{RH}(K_n \setminus P_3)$ et $w_{RH}(K_n \setminus P_4)$ peuvent être obtenus en tant que cas spéciaux des propositions 24 et 25. De plus, $w_{RH}(K_n \setminus P_k) = 0$, pour $k \geq 5$, $n \geq k + 1$, ce qui est une conséquence du théorème 1. En effet, puisque $K_4 \setminus C_4 \subseteq P_k$ pour $k \geq 5$, on a $C_4 \subseteq K_n \setminus P_k$ et on conclut en utilisant (3.22).

Remarque 5 Notons que le phénomène suivant peut se produire pour certains graphes 2-connexes : supposons que $K_n \setminus g$ est 2-connexe pour tout $n \geq p$ et que la formule $f(n)$ est telle que

$$w_{RH}(K_n \setminus g) = f(n) \quad \text{pour } n > p, \quad (4.8)$$

alors pour $n = p$, on peut avoir $w_{RH}(K_p \setminus g) = mf(p)$, $1 < m \in \mathbb{N}$.

4.2 Poids de Mayer de certaines familles infinies de graphes

Dans cette section, nous donnons des formules explicites pour le poids de Mayer des familles infinies précédentes de graphes. Dans ce cas le calcul du poids de Mayer est plus difficile. Au lieu d'utiliser la méthode des homomorphismes de graphes, on utilise la formule (2.17) et le théorème 1. En effet, pour un graphe b , nous rassemblons dans la somme correspondant à (2.17) uniquement les poids de Ree-Hoover non nuls de graphes d avec $b \subseteq d \subseteq K_n$. Ces graphes sont classifiés à isomorphisme près et leurs multiplicités sont calculées dans chaque cas. Puisque les graphes sont de la forme $K_n \setminus g$, alors les surgraphes de $K_n \setminus g$ sont de la forme $K_n \setminus h$, où h est un sous-graphe de g , $h \subseteq g$. En utilisant la formule (2.17) on a

$$\begin{aligned} |w_M(K_n \setminus g)| &= \sum_{k \subseteq g} |w_{RH}(K_n \setminus k)| \\ &= \sum_{h \in \Omega(g)} m(h) |w_{RH}(K_n \setminus h)|, \end{aligned} \quad (4.9)$$

où $\Omega(g)$ est un système de représentants des sous-graphes non étiquetés de g et $m(h)$ est la multiplicité du graphe h , c'est-à-dire, le nombre de graphes de la forme $K_n \setminus k$ isomorphes à $K_n \setminus h$. Dans les propositions suivantes, ces multiplicités peuvent être obtenues dans chaque cas par des arguments combinatoires directs.

4.2.1 Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus S_k$

Proposition 29 Pour $k \geq 1$, $n \geq k + 3$, on a

$$|w_M(K_n \setminus S_k)| = n + 2 \sum_{j=1}^k \frac{j! \binom{k}{j}}{(n-1)(n-2) \cdots (n-j)}. \quad (4.10)$$

Preuve. Les surgraphes de $K_n \setminus S_k$ sont : $K_n \setminus S_j$, $1 \leq j \leq k$ et K_n . Leurs multiplicités sont données par la formule suivante

$$|w_M(K_n \setminus S_k)| = |w_{RH}(K_n)| + \sum_{j=1}^k \binom{k}{j} |w_{RH}(K_n \setminus S_j)|. \quad (4.11)$$

■

4.2.2 Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus S_j - S_k$

Proposition 30 Pour $j \geq k \geq 1$, $n \geq k + j + 3$, soit $g_n = K_n \setminus (S_j - S_k)$. Alors on a

$$|w_M(g_n)| = n + \sum_{l=1}^{j+1} 2 \left[\binom{j+1}{l} + \binom{k+1}{l} \right] \frac{l!}{(n-1) \cdots (n-l)} - \frac{2}{(n-1)} \\ + \sum_{m=1}^j \sum_{l=1}^k 2 \binom{j}{m} \binom{k}{l} \frac{m!l!}{(n-1) \cdots (n-(m+l+1))}. \quad (4.12)$$

Preuve. Les surgraphes de $K_n \setminus S_j - S_k$ dont le poids de Ree-Hoover n'est pas nul sont, à isomorphisme près, de la forme : $K_n \setminus S_l$, $1 \leq l \leq j+1$, $K_n \setminus (S_m - S_l)$, $1 \leq m \leq j$, $1 \leq l \leq k$ et K_n . Leurs multiplicités sont données par la formule suivante

$$|w_M(g_n)| = |w_{RH}(K_n)| + \sum_{l=1}^{j+1} \left[\binom{j+1}{l} + \binom{k+1}{l} \right] |w_{RH}(K_n \setminus S_l)| - |w_{RH}(K_n \setminus S_1)| \\ + \sum_{m=1}^j \sum_{l=1}^k \binom{j}{m} \binom{k}{l} |w_{RH}(K_n \setminus (S_m - S_l))|. \quad (4.13)$$

■

4.2.3 Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus C_4$

Proposition 31 Pour $n \geq 6$, on a

$$|w_M(K_n \setminus C_4)| = n + \frac{8}{(n-1)} + \frac{16}{(n-1)(n-2)} + \frac{16}{(n-1)(n-2)(n-3)}. \quad (4.14)$$

Preuve. Les surgraphes de $K_n \setminus C_4$ dont le poids de Ree-Hoover n'est pas nul sont, à isomorphisme près, de la forme : $K_n \setminus S_1$, $K_n \setminus S_2$, $K_n \setminus C_4$, $K_n \setminus (S_1 - S_1)$ et K_n . Leurs multiplicités sont données par la formule suivante

$$|w_M(K_n \setminus C_4)| = |w_{RH}(K_n)| + \sum_{l=1}^2 4 |w_{RH}(K_n \setminus S_l)| \\ + 4 |w_{RH}(K_n \setminus (S_1 - S_1))| + |w_{RH}(K_n \setminus C_4)|. \quad (4.15)$$

■

4.2.4 Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus (C_4 \cdot S_k)$

Proposition 32 *Pour $k \geq 1$, $n \geq k + 5$, soit $g_n = K_n \setminus (C_4 \cdot S_k)$. Alors on a*

$$\begin{aligned}
|w_M(K_n \setminus (C_4 \cdot S_k))| &= n + \sum_{l=1}^{k+2} 2 \binom{k+2}{l} \frac{l!}{(n-1) \cdots (n-l)} \\
&\quad + \sum_{l=1}^k 4 \binom{k}{l} \frac{l!}{(n-1) \cdots (n-(l+3))} \\
&\quad + \sum_{l=1}^{k+1} 4 \left[\binom{k}{l-1} + \binom{k}{l} \right] \frac{l!}{(n-1) \cdots (n-(l+2))} \\
&\quad + \frac{4}{n-1} + \frac{12}{(n-1)(n-2)} + \frac{12}{(n-1)(n-2)(n-3)}. \quad (4.16)
\end{aligned}$$

Preuve. Les surgraphes de $K_n \setminus (C_4 \cdot S_k)$ dont le poids de Ree-Hoover n'est pas nul sont, à isomorphisme près, de la forme : $K_n \setminus S_l$, $1 \leq l \leq k + 2$, $K_n \setminus (C_4 \cdot S_l)$, $1 \leq l \leq k$, $K_n \setminus (S_1 - S_l)$, $1 \leq l \leq k + 1$, C_4 et K_n . Leurs multiplicités sont données par la formule suivante

$$\begin{aligned}
|w_M(C_4 \cdot S_k)| &= |w_{RH}(K_n)| + \sum_{l=1}^{k+2} \binom{k+2}{l} |w_{RH}(K_n \setminus S_l)| + \sum_{l=1}^k \binom{k}{l} |w_{RH}(K_n \setminus C_4 \cdot S_l)| \\
&\quad + \sum_{l=1}^{k+1} 2 \left[\binom{k}{l-1} + \binom{k}{l} \right] |w_{RH}(K_n \setminus (S_1 - S_l))| + 2|w_{RH}(K_n \setminus S_1)| \\
&\quad + 3|w_{RH}(K_n \setminus S_2)| + |w_{RH}(K_n \setminus C_4)| + 2|w_{RH}(K_n \setminus S_1 - S_1)|. \quad (4.17)
\end{aligned}$$

■

4.2.5 Le poids de Mayer du graphe $K_n \setminus P_k$

Proposition 33 *Pour $k \geq 5$, $n \geq k + 1$, on a*

$$|w_M(K_n \setminus P_k)| = n + \frac{2(k-1)}{(n-1)} + \frac{4(k-2)}{(n-1)(n-2)} + \frac{2(k-3)}{(n-1)(n-2)(n-3)}. \quad (4.18)$$

Preuve. Les surgraphes de $K_n \setminus P_k$, $k \geq 5$, dont le poids de Ree-Hoover n'est pas nul sont, à isomorphisme près, de la forme : $K_n \setminus S_1$, $K_n \setminus S_2$, $K_n \setminus P_4$ et K_n . Leurs multiplicités sont données par la formule suivante

$$\begin{aligned}
 |w_M(K_n \setminus P_k)| &= |w_{RH}(K_n)| + (k-1)|w_{RH}(K_n \setminus S_1)| \\
 &\quad + (k-2)|w_{RH}(K_n \setminus S_2)| + (k-3)|w_{RH}(K_n \setminus P_4)|. \quad (4.19)
 \end{aligned}$$

■

Chapitre V

GRAPHES BIPARTIS COMPLETS, POIDS DE MAYER ET DE REE-HOOVER VERSUS INVARIANTS CLASSIQUES DE GRAPHES

Le calcul explicite du poids de Mayer ou de Ree-Hoover de graphes particuliers est très difficile en général et n'a été effectué seulement que pour quelques familles spéciales de graphes (par exemple, le graphe complet K_n , le cycle C_n , les graphes de la forme $K_n \setminus g$, où g pourrait être un graphe étoile, un cycle, une chaîne, ou une combinaison de quelques-uns de ces graphes, etc).

Le but de ce chapitre est de donner d'abord une formule explicite du poids de Mayer et de Ree-Hoover de la famille doublement indexée $K_{m,n}$ des graphes bipartis complets. Nous illustrons ensuite la "complexité" de l'interprétation combinatoire du poids de Mayer $w_M(b)$ et du poids de Ree-Hoover $w_{RH}(b)$ en montrant que pour un graphe 2-connexe général b , ces poids ne peuvent pas être exprimés comme fonctions faisant seulement appel à certaines familles classiques d'invariants de graphes. Voici maintenant la composition de ce chapitre. Dans la section 5.1, nous rappelons d'abord la définition des fonctions Bêta incomplètes classiques et régularisées. Ensuite, nous établissons de deux façons une formule donnant le poids de Mayer des graphes bipartis complets en faisant appel aux fonctions Bêta. La première méthode consiste en une évaluation détaillée de l'intégrale définissant $w_M(K_{m,n})$. La deuxième utilise une adaptation de la méthode des homomorphismes de graphes et certains arrangements spéciaux de points noirs et blancs dont l'énumération nous permet d'exprimer le poids de Mayer des graphes bipartis complets par une formule close. En utilisant le théorème 1, nous avons montré que le poids de Ree-Hoover des graphes bipartis

complets $K_{m,n}$ ($m, n > 1$) est cependant nul. En section 5.2, nous rappelons d'abord que, dans le cas gaussien, le poids de Mayer en dimension quelconque s'exprime de façon simple à l'aide du nombre d'arbres couvrants, du nombre de sommets et du nombre d'arêtes. Contrairement au cas gaussien, nous montrons ensuite à l'aide d'exemples explicites que dans le cas des particules dures, les poids de Mayer et de Ree-Hoover ne peuvent pas, même en dimension 1, s'exprimer à l'aide de fonctions faisant seulement appel à certaines familles de paramètres classiques associés aux graphes.

5.1 Graphes bipartis complets $K_{m,n}$ et les fonctions Bêta incomplètes

En examinant la table de l'appendice A et (Kaouche et Leroux, 2007c), en utilisant le théorème d'Ehrhart et Maple, nous avons conjecturé la formule explicite à 2 paramètres,

$$w_M(K_{m,n}) = (-1)^{mn} \cdot \frac{2^{m+n-1} m! n!}{(m+n-1)!}, \quad (5.1)$$

pour le poids de Mayer des graphes bipartis complets $K_{m,n}$ (voir la table 5.1).

Légende :

Nom	liste des degrés de c	
	nb d'étiquetages	nb. d'arbres couvrants
graphe c	volume du polytope	volume $\times (n-1)!$
$K_{1,1}$	(1,1)	
	2	1
	2	2
$K_{1,2}$	(2,1,1)	
	2	1
	4	8

$K_{1,3}$	(3,1,1,1)	
	$\frac{6}{8}$	$\frac{1}{48}$
$K_{2,2}$	(2,2,2,2)	
	$\frac{3}{\frac{16}{3}}$	$\frac{4}{32}$
$K_{2,3}$	(3,3,2,2,2)	
	$\frac{10}{8}$	$\frac{12}{192}$
$K_{1,4}$	(4,1,1,1,1)	
	$\frac{5}{16}$	$\frac{1}{384}$
$K_{2,4}$	(4,4,2,2,2,2)	
	$\frac{15}{\frac{64}{5}}$	$\frac{32}{1536}$
$K_{3,3}$	(3,3,3,3,3,3)	
	$\frac{10}{\frac{48}{5}}$	$\frac{81}{1152}$
$K_{1,5}$	(5,1,1,1,1,1)	
	$\frac{6}{32}$	$\frac{1}{3840}$

$K_{2,5}$	(5,5,2,2,2,2,2)	
	21	80
	$\frac{64}{3}$	15360
$K_{3,4}$	(4,4,4,3,3,3,3)	
	35	432
	$\frac{64}{5}$	9216
$K_{1,6}$	(6,1,1,1,1,1,1)	
	7	1
	64	46080
$K_{2,6}$	(6,6,2,2,2,2,2,2)	
	28	192
	$\frac{256}{7}$	184320
$K_{3,5}$	(5,5,5,3,3,3,3,3)	
	56	2025
	$\frac{128}{7}$	92160
$K_{4,4}$	(4,4,4,4,4,4,4,4)	
	35	4096
	$\frac{512}{35}$	73728
$K_{1,7}$	(7,1,1,1,1,1,1,1)	
	8	1
	128	645120

Tableau 5.1 Graphes bipartis complets de taille ≤ 8 .

Le but de cette section est de démontrer la formule (5.1), de deux façons différentes. La première démonstration consiste en une évaluation détaillée de l'intégrale définissant $w_M(K_{m,n})$. La deuxième utilise une adaptation de la méthode des homomorphismes de graphes (voir la section 3.4). La méthode consiste en l'énumération de classes spéciales d'arrangements de points noirs et blancs. Pour les deux méthodes nous allons utiliser des propriétés des fonctions Bêta incomplètes classiques

$$B(x; a, b) = \int_0^x t^{a-1}(1-t)^{b-1} dt, \quad (5.2)$$

et des fonctions Bêta incomplètes régularisées

$$I_x(a, b) = \frac{B(x; a, b)}{B(a, b)}, \quad (5.3)$$

où $B(a, b) = B(1; a, b)$ est la fonction Bêta (complète) (voir (Abramowitz et Stegun, 1974)).

5.1.1 Calcul de $w_M(K_{m,n})$ par évaluation de l'intégrale

Considérons un graphe biparti complet $K_{m,n}$ construit sur $[m]$ et $[n]$ et introduisons des variables x_i pour $i \in [m]$ et y_j pour $j \in [n]$. La formule (3.4) définissant le poids de Mayer prend ici la forme

$$w_M(K_{m,n}) = (-1)^{mn} \int_{\mathbb{R}^{m+n-1}} \prod_{\substack{i \in [m] \\ j \in [n]}} \chi(|x_i - y_j| < 1) dx_1 \dots dx_m dy_1 \dots dy_{n-1}, \quad y_n = 0. \quad (5.4)$$

Cette intégrale s'évalue en plusieurs étapes comme suit :

$$\begin{aligned} w_M(K_{m,n}) &= (-1)^{mn} \int_{\mathbb{R}^{m+n-1}} \prod_{\substack{i \in [m] \\ j \in [n]}} \chi(|x_i - y_j| < 1) dx_1 \dots dx_m dy_1 \dots dy_{n-1}, \quad y_n = 0 \\ &= (-1)^{mn} \int_{\mathbb{R}^{m+n-1}} \prod_{i \in [m]} \chi(|x_i| < 1) \prod_{\substack{i \in [m] \\ j \in [n-1]}} \chi(|x_i - y_j| < 1) dx_1 \dots dx_m dy_1 \dots dy_{n-1} \\ &= (-1)^{mn} \underbrace{\int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1}_m \left(\int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{\substack{i \in [m] \\ j \in [n-1]}} \chi(|x_i - y_j| < 1) dy_1 \dots dy_{n-1} \right) dx_1 \dots dx_m. \end{aligned}$$

Or,

$$\begin{aligned}
\prod_{\substack{i \in [m] \\ j \in [n-1]}} \chi(|x_i - y_j| < 1) = 1 &\Leftrightarrow \forall i \in [m], \forall j \in [n-1] : -1 < y_j - x_i < 1 \\
&\Leftrightarrow \forall j \in [n-1], \forall i \in [m] : -1 + x_i < y_j < 1 + x_i \\
&\Leftrightarrow \forall j \in [n-1] : \max x_i - 1 < y_j < \min x_i + 1 \\
&\Leftrightarrow (y_1, y_2, \dots, y_{n-1}) \in [\max x_i - 1, \min x_i + 1]^{n-1}.
\end{aligned}$$

Donc,

$$\begin{aligned}
w_M(K_{m,n}) &= (-1)^{mn} \underbrace{\int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1}_m ((\min x_i + 1) - (\max x_i - 1))^{n-1} dx_1 \dots dx_m \\
&= (-1)^{mn} \underbrace{\int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1}_m (2 - (\max x_i - \min x_i))^{n-1} dx_1 \dots dx_m.
\end{aligned}$$

Posons $x_i = z_i - 1$. Alors $\max x_i - \min x_i = \max z_i - \min z_i$ et

$$w_M(K_{m,n}) = (-1)^{mn} \underbrace{\int_0^2 \dots \int_0^2}_m (2 - (\max z_i - \min z_i))^{n-1} dz_1 \dots dz_m.$$

On peut supposer que les variables z_i sont distinctes (car l'ensemble où elles sont égales est de mesure nulle). On a m choix pour $\max z_i$ et $m - 1$ choix pour $\min z_i$. Par symétrie, on peut supposer que

$$\min z_i = z_1 \quad \text{et} \quad \max z_i = z_2.$$

On a donc

$$z_1 < z_k < z_2 \quad \forall k \in \{3, 4, \dots, m\}.$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
w_M(K_{m,n}) &= (-1)^{mn} m(m-1) \underbrace{\int_0^2 \cdots \int_0^2}_m (2 - (z_2 - z_1))^{n-1} \chi(z_1 < z_2) \\
&\quad \cdot \prod_{\nu=3}^m \chi(z_1 < z_\nu < z_2) dz_1 \cdots dz_m \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \int_0^2 \int_0^2 (2 - (z_2 - z_1))^{n-1} \chi(z_1 < z_2) \\
&\quad \cdot \left(\underbrace{\int_0^2 \cdots \int_0^2}_{m-2} \prod_{\nu=3}^m \chi(z_1 < z_\nu < z_2) dz_3 \cdots dz_m \right) dz_1 dz_2 \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \int_0^2 \int_0^2 (2 - (z_2 - z_1))^{n-1} \chi(z_1 < z_2) (z_2 - z_1)^{m-2} dz_1 dz_2 \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \int_0^2 \int_{z_1}^2 (2 - (z_2 - z_1))^{n-1} (z_2 - z_1)^{m-2} dz_2 dz_1.
\end{aligned}$$

Posons $z_2 = x + z_1$, on a

$$\begin{aligned}
w_M(K_{m,n}) &= (-1)^{mn} m(m-1) \int_0^2 \left(\int_0^{2-z_1} (2-x)^{n-1} x^{m-2} dx \right) dz_1 \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \int_0^2 \left(\int_0^{2-x} (2-x)^{n-1} x^{m-2} dz_1 \right) dx \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \int_0^2 (2-x)^n x^{m-2} dx.
\end{aligned}$$

Posons $x = 2t$. Alors

$$\begin{aligned}
w_M(K_{m,n}) &= (-1)^{mn} m(m-1) \cdot 2^{m+n-1} \int_0^1 t^{m-2} (1-t)^n dt \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \cdot 2^{m+n-1} \cdot B(m-1, n+1) \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \cdot 2^{m+n-1} \cdot \frac{\Gamma(m-1)\Gamma(n+1)}{\Gamma(m+n)} \\
&= (-1)^{mn} m(m-1) \cdot 2^{m+n-1} \cdot \frac{(m-2)!n!}{(m+n-1)!} \\
&= (-1)^{mn} \cdot \frac{2^{m+n-1} m!n!}{(m+n-1)!}.
\end{aligned}$$

5.1.2 Calcul de $w_M(K_{m,n})$ en utilisant des arrangements de points noirs et blancs

Selon les propositions 17 et 18 du chapitre 3, la formule (5.1) pour $w_M(K_{m,n})$ sera établie si nous calculons le nombre $\nu(K_{m,n})$ de paires (h, β) satisfaisant l'équation (3.32) pour le graphe biparti complet $K_{m,n}$ sur $V = [m + n]$ (voir figure 5.1). Grâce à l'équation (3.33), nous devons montrer que

$$\nu(K_{m,n}) = 2^{m+n-1} m! n!. \quad (5.5)$$

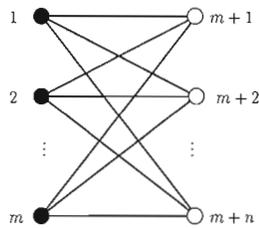


Figure 5.1 Le graphe $K_{m,n}$

Considérons les éléments de $\{1, 2, \dots, m\}$ comme des points noirs étiquetés et les éléments de $\{m + 1, m + 2, \dots, m + n\}$ comme des points blancs étiquetés. Chaque paire valide (h, β) donne lieu à $m!(n - 1)!$ paires valides distinctes en permutant les m points noirs étiquetés entre eux et en faisant la même chose avec les premiers $n - 1$ points blancs étiquetés (le dernier point blanc est fixé puisque $\beta(m + n) = m + n$). La formule (5.5) sera alors prouvée si nous pouvons montrer que

$$\nu_0(K_{m,n}) = 2^{m+n-1} n, \quad (5.6)$$

où $\nu_0(K_{m,n})$ est le nombre d'arrangements de points noirs et blancs non-étiquetés "UDP" dans le plan $\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ satisfaisant les quatre conditions suivantes :

1. Il y a m points noirs et n points blancs.

2. Pour $i = 1, 2, \dots, m+n$, il y a exactement un point noir ou blanc dans $\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ dont l'abscisse est i .
3. Le dernier point est blanc et est à la position $(m+n, -1) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$.
4. Deux points quelconques de couleurs différentes sont soit au même niveau (c'est-à-dire, mêmes ordonnées), soit à deux niveaux différents d'une unité en faisant une pente négative (voir figures 5.2-5.4, où, dans chaque colonne avec une double flèche, le point peut être indépendamment en haut ou en bas).

L'ensemble des UDP se divise en 3 classes selon les positions relatives des points noirs :

1. La classe “-UDP” se compose des UDP dont les points noirs sont tous au même niveau (nécessairement au niveau 0 ou bien au niveau -1) (voir figure 5.2).

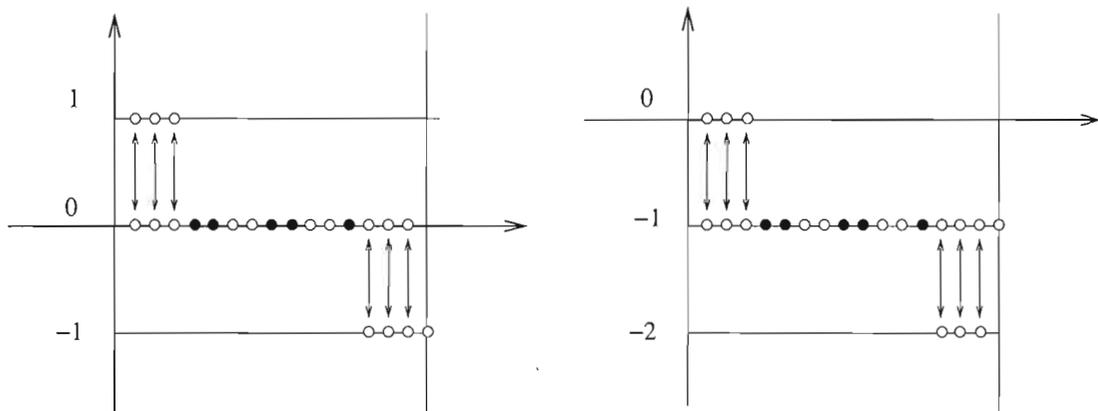


Figure 5.2 La classe “-UDP”

2. La classe “/UDP” se compose des UDP dont les points noirs sont dans deux niveaux différents (nécessairement les niveaux -1 et 0) et pour lesquels le point noir d'extrême gauche au niveau -1 est à la gauche du point noir d'extrême droite au niveau 0 (voir figure 5.3).

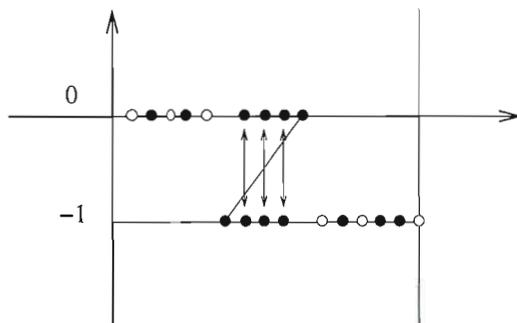


Figure 5.3 La classe “/UDP”

3. La classe “\UDP” se compose des UDP dont les points noirs sont dans deux niveaux différents (nécessairement les niveaux -1 et 0) et pour lesquels le point noir d’extrême gauche au niveau -1 est à la droite du point noir d’extrême droite au niveau 0 (voir figure 5.4).

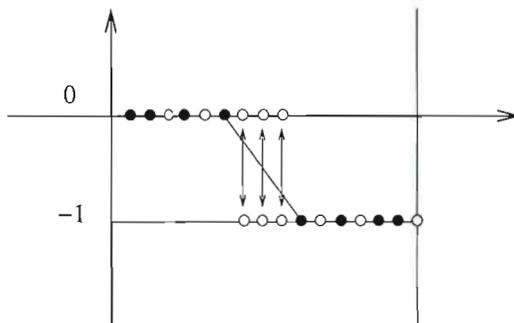


Figure 5.4 La classe “\UDP”

Nous avons besoin des deux lemmes suivants pour énumérer les trois classes d’arrangements précédemment introduites.

Lemme 6 (Deux sommes binomiales finies) *Pour chaque entier $M, N \geq 0$, on a*

$$\sum_{k=0}^N \binom{M+k}{k} x^k = \frac{I_{1-x}(M+1, N+1)}{(1-x)^{M+1}} \quad (5.7)$$

et

$$\sum_{k=0}^N k \binom{M+k}{k} x^k = \frac{(M+1)x I_{1-x}(M+2, N)}{(1-x)^{M+2}}, \quad (5.8)$$

où $I_x(a, b)$ désigne la fonction Bêta incomplète régularisée définie par la formule (5.3).

Preuve. Posons $f(x) = (1-x)^{-(M+1)}$ dans la formule de Taylor avec reste intégral,

$$\sum_{k=0}^N \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k = f(x) - \frac{x^{N+1}}{N!} \int_0^1 (1-u)^N f^{(N+1)}(xu) du. \quad (5.9)$$

Ceci implique

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N \binom{M+k}{k} x^k &= (1-x)^{-(M+1)} - \frac{(M+N+1)!}{M!N!} x^{N+1} \int_0^1 (1-u)^N (1-xu)^{-(M+N+2)} du \\ &= (1-x)^{-(M+1)} \left(1 - \frac{(M+N+1)!}{M!N!} \int_0^x t^N (1-t)^M dt \right), \end{aligned} \quad (5.10)$$

après le changement de variables $u = \frac{x-t}{x(1-t)}$. Ceci prouve (5.7) en utilisant les formules

$$B(M+1, N+1) = \frac{M!N!}{(M+N+1)!}, \quad (5.11)$$

et

$$I_x(a, b) = 1 - I_{1-x}(b, a). \quad (5.12)$$

L'identité (5.8) suit de (5.7) puisque pour $k \geq 1$,

$$k \binom{M+k}{k} = (M+1) \binom{M+k}{k-1}. \quad (5.13)$$

■

Lemme 7 (Relation de récurrence) (Abramowitz et Stegun, 1974, formule 26.5.10) *La fonction Bêta incomplète régularisée satisfait*

$$I_x(a, b) = x I_x(a-1, b) + (1-x) I_x(a, b-1). \quad (5.14)$$

Théorème 3 Pour deux entiers $m, n \geq 1$, on a

a) Le nombre S d'arrangements de points dans la classe “-UDP” est donné par

$$S = \sum_{k=0}^{n-1} (n-k) \binom{m-2+k}{k} 2^{n-k} = 2^{m+n-1} \left(nI_{\frac{1}{2}}(m-1, n) - (m-1)I_{\frac{1}{2}}(m, n-1) \right). \quad (5.15)$$

b) Le nombre T d'arrangements de points dans la classe “/UDP” est donné par

$$T = \sum_{k=0}^{m-1} k \binom{n-1+k}{k} 2^{m-1-k} = n2^{m+n-1} I_{\frac{1}{2}}(n+1, m-1). \quad (5.16)$$

c) Le nombre U d'arrangements de points dans la classe “\UDP” est donné par

$$U = \sum_{k=0}^n k \binom{m-2+k}{k} 2^{n-k} = (m-1)2^{m+n-1} I_{\frac{1}{2}}(m, n). \quad (5.17)$$

Finalement, le poids de Mayer des graphes bipartis complets $K_{m,n}$ est donné par

$$w_M(K_{m,n}) = (-1)^{mn} \cdot \frac{2^{m+n-1} m! n!}{(m+n-1)!}. \quad (5.18)$$

Preuve.

Pour $m \leq 1$, les résultats sont trivialement vrais. Alors, soit $m \geq 2$.

1. Une translation verticale d'une unité vers le bas des $m+n-1$ points dans l'arrangement de gauche de la figure 5.2 produit l'arrangement de droite. Par conséquent, la classe “-UDP” se divise en deux classes ayant la même cardinalité. Ainsi, concentrons nous seulement sur l'énumération des arrangements de gauche de la figure 5.2. Soit k le nombre de points blancs entre le premier et le dernier point noir. Le premier point noir peut être seulement en position $1, 2, \dots$, ou $n-k$. Pour chacune de ces positions, les k points blancs peuvent être choisis de $\binom{m-2+k}{k}$ façons. Puisque nous avons 2^{n-k-1} colonnes avec des doubles flèches et $0 \leq k \leq n-1$, le nombre total des UDP dans la classe “-UDP” est donné par

$$S = 2 \cdot \sum_{k=0}^{n-1} (n-k) \binom{m-2+k}{k} 2^{n-k-1}. \quad (5.19)$$

Le terme de droite de (5.15) suit du lemme 6 avec $x = \frac{1}{2}$ puisque,

$$S = 2^n \left(n \sum_{k=0}^{n-1} \binom{m-2+k}{k} \left(\frac{1}{2}\right)^k - \sum_{k=0}^{n-1} k \binom{m-2+k}{k} \left(\frac{1}{2}\right)^k \right). \quad (5.20)$$

2. Soit maintenant $m - r$ le nombre total de points noirs allant du point noir d'extrême gauche au niveau -1 (c'est-à-dire qui a la plus petite abscisse parmi ceux de la forme $(x, -1)$) au point noir d'extrême droite au niveau 0 (c'est-à-dire qui a la plus grande abscisse parmi celles de la forme $(x, 0)$) inclusivement (voir figure 5.3). Le premier point noir au niveau -1 peut être seulement en position $1, 2, \dots, \text{ou } n + r$. Pour chacune de ces positions, les $m - r - 2$ points noirs entre le point noir d'extrême gauche au niveau -1 et le point noir d'extrême droite au niveau 0 peuvent être choisis de 2^{m-r-2} façons. Il reste $\binom{n+r-1}{r}$ choix de positions pour les points noirs restants. Puisque $0 \leq r \leq m - 2$, le nombre total des UDP dans la classe “/UDP” est donné par

$$T = \sum_{r=0}^{m-2} (n+r) \binom{n+r-1}{r} 2^{m-r-2} = \sum_{k=0}^{m-1} k \binom{n-1+k}{k} 2^{m-1-k}, \quad (5.21)$$

en utilisant l'identité

$$\alpha \binom{\alpha-1}{r} = (r+1) \binom{\alpha}{r+1}. \quad (5.22)$$

Le terme du membre droit de l'équation (5.16) suit de (5.8) du lemme 6, avec $x = \frac{1}{2}$, $M = n - 1$, $N = m - 1$.

3. Soit $n + 1 - r$ le nombre total de points allant du point noir d'extrême droite au niveau 0 au point noir d'extrême gauche au niveau -1 inclusivement (voir figure 5.4). Le dernier point noir au niveau 0 peut être seulement en position $1, 2, \dots, \text{ou } m + r - 1$. Pour chacune de ces positions, les $n - 1 - r$ points blancs entre le point noir d'extrême droite au niveau 0 et le point noir d'extrême gauche au niveau -1 peuvent être choisis de 2^{n-1-r} façons. Il reste $\binom{m+r-2}{m-2}$ choix de positions pour les points noirs restants. Puisque $0 \leq r \leq n - 1$, le nombre total des UDP dans la classe “\UDP” est donné par

$$U = \sum_{r=0}^{n-1} (m+r-1) \binom{m+r-2}{r} 2^{n-1-r} = \sum_{k=0}^n k \binom{m-2+k}{k} 2^{n-k}, \quad (5.23)$$

en utilisant l'identité (5.22). Le terme du membre droit de l'équation (5.17) suit du lemme 6, avec $x = \frac{1}{2}$, $M = m - 2$, $N = n$.

Finalement, en utilisant le lemme 7, avec $x = \frac{1}{2}$, $a = n + 1$ et $b = m - 1$, on obtient

$$\begin{aligned} T(m, n) &= n2^{m+n-1} - \frac{n}{m-2}T(n+2, m-2), \\ &= n2^{m+n-1} - \sum_{k=0}^n n \binom{m-2+k}{k} 2^{n-k}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

En faisant appel aux équations (5.19), (5.23) et (5.24), on obtient, après simplification,

$$S + T + U = n2^{m+n-1}.$$

■

Remarque 6 À partir de la formule (5.1), on obtient directement

$$w_M(K_{n,n-1}) = (-1)^n w_M(K_{n,n-2}), \quad n \geq 4, \quad (5.25)$$

et

$$w_M(K_{m,n+1}) = (-1)^m \frac{2(n+1)}{n+m} w_M(K_{m,n}). \quad (5.26)$$

Remarque 7 À l'aide de Maple nous avons montré que pour $k \geq 3$, la formule

$$2^{n_1+n_2+\dots+n_k-1} n_1! n_2! \dots n_k! / (n_1 + n_2 + \dots + n_k - 1)!, \quad (5.27)$$

ne donne pas le poids de Mayer des graphes multipartis complets K_{n_1, n_2, \dots, n_k} . Pour $k \geq 3$, le problème du calcul exact de $w_M(K_{n_1, n_2, \dots, n_k})$ est encore ouvert.

Proposition 34 Si $k \geq 2$, alors

$$w_{RH}(K_{n_1, n_2, \dots, n_k}) = 0$$

s'il existe i, j tels que $i \neq j$, $n_i > 1$ et $n_j > 1$.

Preuve. C'est une conséquence du théorème 1, puisque $C_4 \subseteq K_{n_1, n_2, \dots, n_k}$.

■

5.2 Le poids de Mayer et de Ree-Hoover versus quelques invariants de graphes

5.2.1 La relation entre le modèle gaussien et la complexité d'un graphe

Commençons par le cas particulier d'une interaction gaussienne entre les particules. Dans ce cas, la fonction d'interaction est donné par

$$f_{ij} = -\exp(-\alpha\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|^2), \quad \alpha > 0, \quad (5.28)$$

qui correspond à une répulsion douce à température constante. La fonction

$$f(r) = -\exp(-\alpha r^2) \quad (5.29)$$

satisfait les hypothèses de la proposition 3 (chapitre 1). Le deuxième poids de Mayer $w_M(c)$ peut donc être, en principe, calculé pour n'importe quel graphe connexe c . Rappelons que la complexité $\gamma(c)$ d'un graphe connexe c est définie comme le nombre de sous-arbres couvrants de c . Notons par $e(c)$ le nombre d'arêtes de c . Le nombre $\gamma(c)$ intervient directement dans le calcul du poids de Mayer $w_M(c)$. C'est le contenu du théorème suivant tiré de (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007).

Théorème 4 *Dans le modèle gaussien, en dimension d , le deuxième poids de Mayer*

$$w_M(c) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_{V^n} \prod_{\{i,j\} \in c} -\exp(-\alpha\|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|^2) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \quad (5.30)$$

d'un graphe connexe c avec n sommets, a comme valeur

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{d(n-1)}{2}} \gamma(c)^{-\frac{d}{2}}. \quad (5.31)$$

Une extension du modèle gaussien est donnée par le théorème 5 tiré de (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007) qui contient une généralisation de la formule (5.31) qui fait appel à la distribution des degrés des sommets des sous-arbres couvrants. Soit $T(c)$ l'ensemble de tous les sous-arbres couvrants d'un graphe connexe c , et soit $d_t(i)$ le degré du sommet i dans l'arbre couvrant t , $t \in T(c)$.

Théorème 5 Pour les fonctions d'interaction f_{ij} définies par

$$f_{ij} = -\exp(-\alpha y_i y_j \|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|^2), \quad (5.32)$$

où les y_i sont des variables positives, le deuxième poids de Mayer en dimension d ,

$$w_M(c) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_{V^n} \prod_{\{i,j\} \in c} -\exp(-\alpha y_i y_j \|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|^2) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \quad (5.33)$$

d'un graphe connexe c avec les sommets $\{1, 2, \dots, n\}$, a la valeur

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{d(n-1)}{2}} \left(\sum_{t \in T(c)} y_1^{d_t(1)} y_2^{d_t(2)} \dots y_n^{d_t(n)} \right)^{-\frac{d}{2}}. \quad (5.34)$$

Remarque 8 Il est possible d'étendre encore plus ce résultat en prenant

$$f_{ij} = -\exp(-w_{i,j} \|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|^2), \quad (5.35)$$

où les $w_{i,j}$ sont des poids généraux (positifs) associés aux arêtes. Dans ce cas, le poids de Mayer d'un graphe connexe c s'exprime à l'aide du polynôme énumérateur des sous-arbres couvrants de c pondérés par le produit des poids de leurs arêtes. En effet, en invoquant une forme plus générale de la formule de Kirchoff voir, par exemple (Sylvester, 1857), (Borchardt, 1860) et (Chaiken et Kleitman, 1978), la formule suivante est énoncée dans (Labelle, Leroux et Ducharme, 2007)

$$w_M(c) = (-1)^{e(c)} \pi^{\frac{d(n-1)}{2}} \left(\sum_{t \in T(c)} \prod_{\{i,j\} \in t} w_{i,j} \right)^{-\frac{d}{2}}. \quad (5.36)$$

5.2.2 Poids w_M et w_{RH} versus invariants classiques pour les particules dures

Contrairement au cas gaussien, il n'est pas évident dans le cas des particules dures, même en dimension 1, d'exprimer le poids de Mayer et le poids de Ree-Hoover à l'aide d'une formule faisant appel à certains paramètres classiques associés aux graphes. En effet, nous illustrons la "complexité" des interprétations combinatoires du poids de Mayer $w_M(b)$ et du poids de Ree-Hoover $w_{RH}(b)$ en montrant que pour un graphe 2-connexe général b , ces poids ne peuvent pas être exprimés comme

fonctions faisant appel à seulement certaines sous-familles des invariants de graphes suivants : liste des degrés, nombre d'arêtes, nombre de sommets, star content, nombre d'arbres couvrants, ordre du groupe d'automorphismes, volume du polytope de Mayer, volume total des polytopes de Ree-Hoover, poids de Mayer w_M (dans le cas du poids du Ree-Hoover w_{RH}), poids de Ree-Hoover w_{RH} (dans le cas du poids de Mayer w_M).

Plus précisément, en utilisant la librairie Maple "GraphTheory" et les tables de l'appendice A et (Kaouche et Leroux, 2007c) pour les graphes 2-connexes ayant jusqu'à 8 sommets, nous donnons des exemples explicites de graphes 2-connexes g_1, g_2 dont les poids de Mayer (ou de Ree-Hoover) sont différents mais ayant pourtant le même ensemble d'invariants pris de la liste ci-dessus. Ces exemples montrent donc que les poids de Mayer et de Ree-Hoover ne sont pas fonctions de ces paramètres seulement. Dans la recherche "informatisée", faisant appel à 7662 graphes, toutes les sous-listes des invariants ont été examinées et nous avons gardé seulement celles qui sont maximales. Cette section constitue une partie de notre conférence (Kaouche et Leroux, 2008b).

5.2.2.1 Exemples pour le cas du poids de Mayer

a) Les deux graphes 2-connexes g_1 et g_2 de la figure 5.5 ont des poids de Mayer distincts mais tous les deux ont les mêmes :

- Nombres de sommets : 8,
- Listes des degrés : $[6, 5^4, 4^3]$,
- Nombres d'arbres couvrants : 12852,
- Nombres d'arêtes : 19,
- Poids de Ree-Hoover : 0,
- Ordres du groupe d'automorphismes : 2.

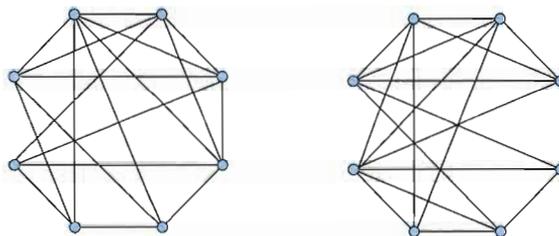


Figure 5.5 $w_M(g_1) = -\frac{3856}{315} \neq w_M(g_2) = -\frac{1103}{90}$

b) Les deux graphes 2-connexes g_1 et g_2 de la figure 5.8 ont des poids de Ree-Hoover distincts mais tous les deux ont les mêmes :

- Nombres de sommets : 7, - Nombres d'arêtes : 13,
- Listes des degrés : $[5^2, 4^3, 2^2]$, - Ordres du groupe d'automorphismes : 2,
- Star content : 0.

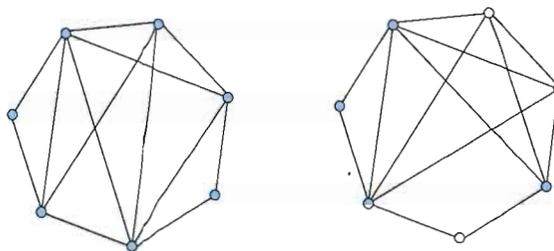


Figure 5.8 $w_{RH}(g_1) = -\frac{1}{360} \neq w_{RH}(g_2) = 0$

c) Les deux graphes 2-connexes g_1 et g_2 de la figure 5.9 ont des poids de Ree-Hoover distincts mais tous les deux ont les mêmes :

- Nombres de sommets : 6, - Volumes des polytopes de Ree-Hoover : $\frac{1}{5}$,
- Ordres du groupe d'automorphismes : 12, - Star content : 0.

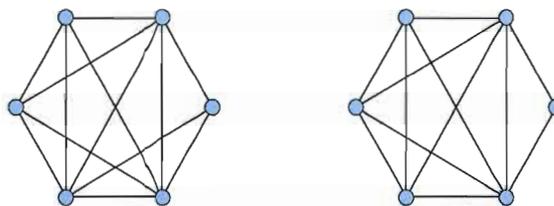


Figure 5.9 $w_{RH}(g_1) = -\frac{1}{5} \neq w_{RH}(g_2) = \frac{1}{5}$

Chapitre VI

POIDS DE MAYER ET TRANSFORMÉES DE FOURIER

Diverses méthodes ont été développées dans la littérature pour le calcul approximatif ou exact des poids de Mayer (voir par exemple, (Phillies, 2000; Clisby et McCoy, 2006) et leurs bibliographies) : changements de variables, utilisation de symétries, analyse de Fourier, fonctions spéciales (polynômes orthogonaux, harmoniques sphériques, fonctions de Bessel, etc), intégration numérique, méthodes de Monte-Carlo. Nous avons vu dans les chapitres précédents, dans le cas d'un gaz à noyaux durs et à positions continues en une dimension, que l'utilisation de la méthode des homomorphismes de graphes ainsi que l'utilisation du polynôme d'Ehrhart permettent le calcul exact du poids de Mayer et de Ree-Hoover de graphes individuels ou de familles spéciales de graphes.

Dans le présent chapitre, nous adaptons la méthode des transformées de Fourier dans le but de développer de nouvelles formules exactes ou asymptotiques pour le poids de Mayer. La section 6.1 utilise la notion d'arborescence couvrante croissante d'un graphe connexe afin d'obtenir un changement de variables qui va nous permettre d'exprimer le poids de Mayer pour une interaction quelconque et en dimension quelconque sous la forme d'une intégrale dont les variables sont en bijection avec les arêtes de l'arborescence couvrante. En utilisant les transformées de Fourier, nous transformons ensuite cette intégrale, dans la section 6.2, en une nouvelle intégrale générale dont les variables sont, cette fois, en bijection avec les arêtes complémentaires de l'arborescence couvrante. Cette méthode est illustrée dans la section 6.3 sur divers exemples particuliers. Nous

l'utilisons aussi pour obtenir en dimension d , dans le cas des particules dures, des formules exactes et asymptotiques, dans le cas où le graphe est un cycle aussi appelé ("ring diagram"). La section 6.4 est consacrée au développement d'un algorithme de calcul du poids de Mayer dans le cas des particules dures en dimension 1, en utilisant toujours les transformées de Fourier. Cet algorithme fait appel aux différences divisées ainsi qu'à un lemme d'intégration spécial. Enfin, nous illustrons cet algorithme en l'appliquant à divers exemples de graphes, incluant les roues et les graphes échelles. Ce chapitre constitue une version détaillée de notre conférence (Kaouche et Labelle, 2008).

6.1 Changement de variables via une arborescence couvrante

Pour des raisons techniques, dans le présent chapitre, les n sommets de nos graphes seront étiquetés

$$0, 1, 2, \dots, n - 1$$

et nous posons $k = n - 1$. Dans l'intégrale définissant le poids de Mayer, on fixe la variable \vec{x}_0 à zéro (au lieu de \vec{x}_n). Le poids de Mayer d'un graphe connexe c sur $\{0, 1, \dots, n - 1\}$ est alors donné par

$$w_M(c) = \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d}}_k \prod_{ij \in c, \vec{x}_0 = \vec{0}} f(\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|) d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_k, \quad (6.1)$$

en dimension quelconque d et pour une interaction quelconque f , où ij désigne l'arête $\{i, j\}$.

Afin d'exprimer l'intégrale (6.1) sous une forme plus directement manipulable, nous allons effectuer un changement de variables basé sur l'utilisation d'une arborescence couvrante a associée au graphe c . Comme la valeur du poids de Mayer est indépendante de l'étiquetage du graphe c , on peut toujours supposer que l'arborescence couvrante est enracinée en 0, ses arêtes sont toutes orientées vers la racine et l'arborescence est croissante au sens où pour toute arête $\{i, j\}$ de a ,

$$i \leftarrow j \Leftrightarrow i < j, \quad (6.2)$$

voir figure 6.1, où l'arborescence couvrante croissante est composée des arêtes rouges.

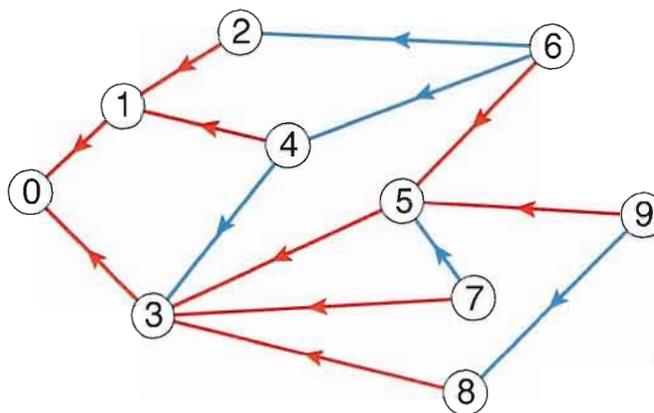


Figure 6.1 Un graphe connexe g_{10} avec une arborescence couvrante

L'ensemble $c \setminus a$ des arêtes de c complémentaires à a (en bleu dans le figure 6.1) sont elles aussi orientées canoniquement par la même convention décrite en (6.2). Notons que la donnée d'une arborescence croissante a est équivalente à la donnée d'une fonction

$$\alpha : \{1, 2, \dots, k\} \rightarrow \{0, 1, \dots, k-1\}, \quad (6.3)$$

satisfaisant $\alpha(j) < j, j = 1, 2, \dots, k$, en posant

$$i = \alpha(j) \iff \alpha(j) \leftarrow j \text{ dans } a. \quad (6.4)$$

Effectuons le changement de variables suivant (voir figure 6.2) en introduisant des nouvelles variables \vec{u}_j définies par

$$\vec{u}_j = \vec{x}_j - \vec{x}_{\alpha(j)} \iff \vec{x}_j = \vec{u}_j + \vec{u}_{\alpha(j)} + \vec{u}_{\alpha^2(j)} + \dots \quad (6.5)$$

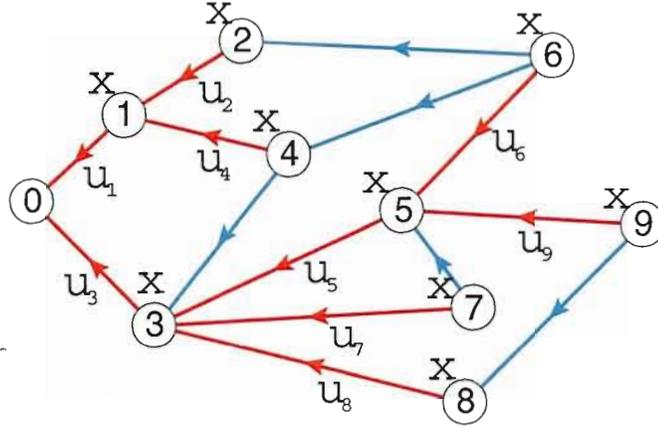


Figure 6.2 Variables u_j associées à l'arborescence couvrante, $j = 1, 2, \dots, k$

pour $j = 1, 2, \dots, k$. Les nouvelles variables \vec{u}_j sont donc en bijection avec les arêtes de l'arborescence croissante et l'intégrale de Mayer prend la forme

$$w_M(c) = \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d}}_k \prod_{\nu=1}^k f(\|\vec{u}_\nu\|) \prod_{ij \in c \setminus a} f(\|V(\vec{u}_j, \vec{u}_i)\|) d\vec{u}_1 \cdots d\vec{u}_k, \quad (6.6)$$

où

$$V(\vec{u}_j, \vec{u}_i) = (\vec{u}_j + \vec{u}_{\alpha(j)} + \vec{u}_{\alpha^2(j)} + \cdots) - (\vec{u}_i + \vec{u}_{\alpha(i)} + \vec{u}_{\alpha^2(i)} + \cdots). \quad (6.7)$$

Dans cette dernière intégrale, le premier produit est effectué selon les variables associées aux k arêtes de l'arborescence, tandis que le second produit est associé aux arêtes du complémentaire de cette arborescence par rapport au graphe c .

6.2 Reformulation du poids de Mayer à l'aide des transformées de Fourier

Rappelons que la transformée de Fourier d'une fonction intégrable $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ est définie par

$$\hat{F}(\vec{t}) = \int_{\mathbb{R}^d} F(\vec{x}) e^{-i(\vec{t} \cdot \vec{x})} d\vec{x}, \quad (6.8)$$

où $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$, $\vec{t} = (t_1, t_2, \dots, t_d)$, $\vec{t} \cdot \vec{x} = t_1 x_1 \dots + t_d x_d$, $d\vec{x} = dx_1 \dots dx_d$.

Le théorème d'inversion de Fourier affirme que, sous certaines conditions (voir (Champeney, 1987)), on peut retrouver (presque partout) la fonction initiale F à partir de sa transformée de Fourier par la formule

$$F(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{F}(\vec{t}) e^{i(\vec{t} \cdot \vec{x})} d\vec{t}. \quad (6.9)$$

L'intégrale (6.9) est prise dans le sens de la valeur principale lorsque $\widehat{F}(\vec{t})$ tend lentement vers 0 pour $\|\vec{t}\| \rightarrow \infty$:

$$F(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{[-R, R]^d} \widehat{F}(\vec{t}) e^{i(\vec{t} \cdot \vec{x})} d\vec{t}. \quad (6.10)$$

Dans le présent travail, nous supposons que l'inversion de Fourier est valide pour la fonction

$$F(\vec{x}) = f(\|\vec{x}\|), \quad (6.11)$$

où f est la fonction d'interaction.

Le théorème suivant permet d'exprimer l'intégrale (6.6) pour $w_M(c)$ à l'aide de la fonction \widehat{F} .

Théorème 6 Soit $\widehat{F}(\vec{t})$ la transformée de Fourier de $F(\vec{x}) = f(\|\vec{x}\|)$. Alors,

$$w_M(c) = \frac{1}{(2\pi)^d |c \setminus a|} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d}}_{|c \setminus a|} \prod_{e \in c \setminus a} \widehat{F}(\vec{t}_e) \prod_{\nu=1}^k \widehat{F} \left(\sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e \right) \prod_{e \in c \setminus a} d\vec{t}_e, \quad (6.12)$$

où \vec{t}_e est une variable vectorielle associée à chaque arête $e \in c \setminus a$ du complémentaire de l'arborescence a par rapport au graphe c , a_ν désigne la sous-arborescence de a enracinée en ν , pour tout $\nu \in \{1, 2, \dots, k\}$. La notation $\sum_{a_\nu \prec e}$ (respectivement $\sum_{e \prec a_\nu}$) signifie que la sommation est effectuée sur toutes les arêtes $e \in c \setminus a$ dont l'extrémité finale (respectivement initiale) est un sommet de a_ν et où la notation $|c \setminus a|$ désigne le nombre d'arêtes du graphe $c \setminus a$ (voir figure 6.3).

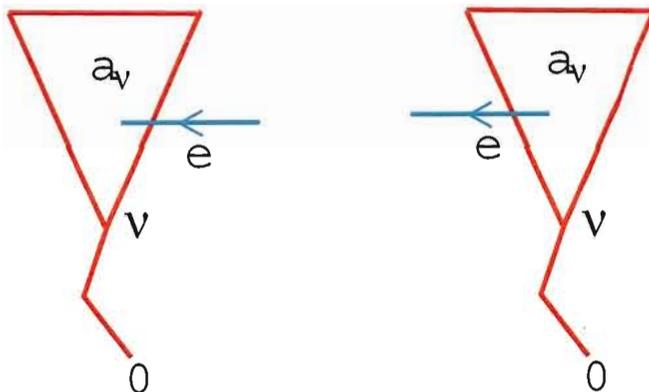


Figure 6.3 a) $a_\nu < e$, b) $e < a_\nu$

Preuve. En substituant

$$f(\|V(\vec{u}_j, \vec{u}_i)\|) = F(V(\vec{u}_j, \vec{u}_i)) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{F}(\vec{t}_{ij}) e^{i(\vec{t}_{ij} \cdot V(\vec{u}_j, \vec{u}_i))} d\vec{t}_{ij}, \quad (6.13)$$

dans

$$w_M(c) = \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d}}_k \prod_{\nu=1}^k f(\|\vec{u}_\nu\|) \prod_{ij \in c \setminus a} f(\|V(\vec{u}_j, \vec{u}_i)\|) d\vec{u}_1 \cdots d\vec{u}_k, \quad (6.14)$$

on obtient successivement

$$\begin{aligned} w_M(c) &= \int_{\mathbb{R}^{kd}} \prod_{\nu=1}^k F(\vec{u}_\nu) \prod_{ij \in c \setminus a} F(V(\vec{u}_j, \vec{u}_i)) d\vec{u}_1 \cdots d\vec{u}_k \\ &= \int_{\mathbb{R}^{kd}} \prod_{\nu=1}^k F(\vec{u}_\nu) \prod_{ij \in c \setminus a} \left(\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{F}(\vec{t}_{ij}) e^{i(\vec{t}_{ij} \cdot V(\vec{u}_j, \vec{u}_i))} d\vec{t}_{ij} \right) d\vec{u}_1 \cdots d\vec{u}_k \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d|c \setminus a|}} \int_{\mathbb{R}^{kd}} \prod_{\nu=1}^k F(\vec{u}_\nu) \int_{\mathbb{R}^{d|c \setminus a|}} \left(\prod_{ij \in c \setminus a} \widehat{F}(\vec{t}_{ij}) \right) e^{i s(\vec{t}, \vec{u})} \left(\prod_{ij \in c \setminus a} d\vec{t}_{ij} \right) d\vec{u}_1 \cdots d\vec{u}_k, \end{aligned} \quad (6.15)$$

où

$$\begin{aligned} s(\vec{t}, \vec{u}) &= \sum_{ij \in c \setminus a} \vec{t}_{ij} \cdot V(\vec{u}_j, \vec{u}_i) \\ &= \sum_{ij \in c \setminus a} \vec{t}_{ij} \cdot ((\vec{u}_j + \vec{u}_{\alpha(j)} + \vec{u}_{\alpha^2(j)} + \cdots) - (\vec{u}_i + \vec{u}_{\alpha(i)} + \vec{u}_{\alpha^2(i)} + \cdots)), \end{aligned}$$

et $\alpha : \{1, 2, \dots, k\} \rightarrow \{0, 1, \dots, k-1\}$ est la fonction décrivant l'arborescence a . Le coefficient de \vec{u}_ν dans le développement de $s(\vec{t}, \vec{u})$ est donné par

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{ij \in c \setminus a \\ \exists p: \alpha^p(j) = \nu}} \vec{t}_{ij} - \sum_{\substack{ij \in c \setminus a \\ \exists q: \alpha^q(i) = \nu}} \vec{t}_{ij} &= \sum_{\substack{ij \in c \setminus a \\ j: \text{sommet de } a_\nu}} \vec{t}_{ij} - \sum_{\substack{ij \in c \setminus a \\ i: \text{sommet de } a_\nu}} \vec{t}_{ij} \\ &= \sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e - \sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Donc,

$$e^i s(\vec{t}, \vec{u}) = e^{i \sum_{ij \in c \setminus a} \vec{t}_{ij} \cdot V(\vec{u}_j, \vec{u}_i)} = e^{i \sum_{\nu=1}^k (\sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e - \sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e) \cdot \vec{u}_\nu}. \quad (6.17)$$

Ainsi, en utilisant (6.15), on obtient

$$\begin{aligned} w_M(c) &= \frac{1}{(2\pi)^{d|c \setminus a|}} \int_{\mathbb{R}^{d|c \setminus a|}} \left[\prod_{ij \in c \setminus a} \widehat{F}(\vec{t}_{ij}) \int_{\mathbb{R}^{kd}} \left(\prod_{\nu=1}^k F(\vec{u}_\nu) e^{is(\vec{t}, \vec{u})} \right) d\vec{u}_1 \cdots d\vec{u}_k \right] \prod_{ij \in c \setminus a} d\vec{t}_{ij} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d|c \setminus a|}} \int_{\mathbb{R}^{d|c \setminus a|}} \left[\prod_{e \in c \setminus a} \widehat{F}(\vec{t}_e) \prod_{\nu=1}^k \left(\int_{\mathbb{R}^d} F(\vec{u}_\nu) e^{-i(\sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e) \cdot \vec{u}_\nu} d\vec{u}_\nu \right) \right] \prod_{e \in c \setminus a} d\vec{t}_e \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d|c \setminus a|}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d}}_{|c \setminus a|} \prod_{e \in c \setminus a} \widehat{F}(\vec{t}_e) \prod_{\nu=1}^k \widehat{F} \left(\sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e \right) \prod_{e \in c \setminus a} d\vec{t}_e, \end{aligned}$$

ce qui conclut la preuve. ■

Remarque 9 Bien que tout à fait générale, la formule (6.12) est particulièrement efficace lorsque $|c \setminus a|$ est assez petit, puisque le nombre d'intégrales $\int_{\mathbb{R}^d}$ emboîtées est égal à $|c \setminus a|$.

6.3 Illustration de la méthode pour des graphes particuliers

6.3.1 Exemples spécifiques

Nous allons montrer comment le théorème 6 s'applique facilement dans des cas particuliers.

Exemple. (Le cas du cycle C_n à n sommets "ring diagram") Le graphe 2-connexe c pour lequel $|c \setminus a|$ est le plus petit est le cycle. Dans ce cas a est une chaîne et $c \setminus a$ est réduit à une seule arête (voir figure 6.4, pour $n = 7, k = 6$).

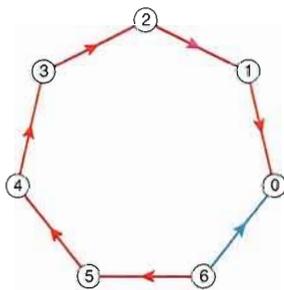


Figure 6.4 Le cycle C_7 et son arborescence croissante

La formule (6.12) prend alors la forme très simple, explicitée pour la première fois par Katsura (voir G. D. J. Phillies ; 2000),

$$w_M(C_n) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{F}(\vec{t})^n d\vec{t}. \quad (6.18)$$

On le voit facilement comme suit en utilisant le théorème 6. Soit $e = 0k = (0 \leftarrow k)$ l'unique arête de $c \setminus a$. Alors, pour $\nu = 1, 2, \dots, k$, la sous-arborescence a_ν a la forme

$$a_\nu = (\nu \leftarrow \nu + 1 \leftarrow \dots \leftarrow k). \quad (6.19)$$

Ainsi, $\forall \nu \in \{1, 2, \dots, k\}$, on a

$$\sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e = -t_e. \quad (6.20)$$

La formule (6.12) devient

$$w_M(C_n) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{F}(\vec{t}_e) \widehat{F}(-\vec{t}_e)^k d\vec{t}_e, \quad (6.21)$$

ce qui équivaut à (6.18), puisque $\widehat{F}(-\vec{t}) = \widehat{F}(\vec{t})$ et $n = k + 1$.

Exemple. (Le graphe $K_4 \setminus e$) Soit $K_4 \setminus e$ le graphe obtenu à partir du graphe complet à 4 sommets en lui enlevant une arête (voir figure 6.5).

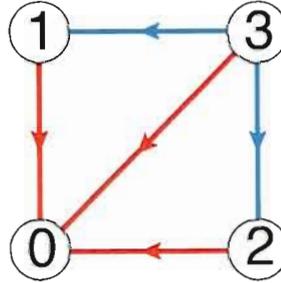


Figure 6.5 Le graphe $K_4 \setminus e$

Ce graphe est important dans le calcul du 4^e coefficient du viriel dans le cas général, (voir (Philips, 2000)). Ici, la formule (6.12) prend la forme

$$w_M(K_4 \setminus e) = \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{F}(\vec{u})^2 \widehat{F}(\vec{v})^2 \widehat{F}(\vec{u} + \vec{v}) d\vec{u} d\vec{v}. \quad (6.22)$$

On le vérifie directement en posant d'abord $\vec{u} = \vec{t}_{13}$, $\vec{v} = \vec{t}_{23}$. Pour $\nu = 1, 2, 3$, on a les sous-arborescences triviales suivantes de l'arborescence couvrante a :

$$a_1 = \{1\}, a_2 = \{2\}, a_3 = \{3\}.$$

Ainsi, pour $\nu = 1, 2, 3$,

$$\begin{aligned} \sum_{a_1 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_1} \vec{t}_e &= \vec{t}_{13} = \vec{u}, \\ \sum_{a_2 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_2} \vec{t}_e &= \vec{t}_{23} = \vec{v}, \\ \sum_{a_3 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_3} \vec{t}_e &= -\vec{t}_{13} - \vec{t}_{23} = -(\vec{u} + \vec{v}), \end{aligned}$$

et on conclut en utilisant encore une fois le fait que $\widehat{F}(\overrightarrow{-t}) = \widehat{F}(\overrightarrow{t})$.

Exemple. (Le cas du graphe g_{10}) Soit le graphe g_{10} sur l'ensemble de sommets $\{0, 1, \dots, 9\}$ donné par la figure 6.1. Pour $\nu = 1, 2, \dots, 9$, les ensembles de sommets des sous-arborescences a_1, \dots, a_9 sont donnés par

$$\begin{aligned} a_1 &= \{1, 2, 4\}, \\ a_2 &= \{2\}, \\ a_3 &= \{3, 5, 6, 7, 8, 9\}, \\ a_4 &= \{4\}, \\ a_5 &= \{5, 6, 9\}, \\ a_6 &= \{6\}, \\ a_7 &= \{7\}, \\ a_8 &= \{8\}, \\ a_9 &= \{9\}. \end{aligned}$$

En posant $\overrightarrow{v}_1 = \overrightarrow{t}_{26}$, $\overrightarrow{v}_2 = \overrightarrow{t}_{46}$, $\overrightarrow{v}_3 = \overrightarrow{t}_{34}$, $\overrightarrow{v}_4 = \overrightarrow{t}_{57}$, $\overrightarrow{v}_5 = \overrightarrow{t}_{89}$, on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{a_1 \prec e} \overrightarrow{t}_e - \sum_{e \prec a_1} \overrightarrow{t}_e &= \overrightarrow{t}_{26} + \overrightarrow{t}_{46} - \overrightarrow{t}_{34} = \overrightarrow{v}_1 + \overrightarrow{v}_2 - \overrightarrow{v}_3, \\ \sum_{a_2 \prec e} \overrightarrow{t}_e - \sum_{e \prec a_2} \overrightarrow{t}_e &= \overrightarrow{t}_{26} = \overrightarrow{v}_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{a_3 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_3} \vec{t}_e &= \vec{t}_{34} - \vec{t}_{26} - \vec{t}_{46} = \vec{v}_3 - \vec{v}_1 - \vec{v}_2, \\
\sum_{a_4 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_4} \vec{t}_e &= \vec{t}_{46} - \vec{t}_{34} = \vec{v}_2 - \vec{v}_3, \\
\sum_{a_5 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_5} \vec{t}_e &= \vec{t}_{57} - \vec{t}_{26} - \vec{t}_{46} - \vec{t}_{89} = \vec{v}_4 - \vec{v}_1 - \vec{v}_2 - \vec{v}_5, \\
\sum_{a_6 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_6} \vec{t}_e &= -\vec{t}_{26} - \vec{t}_{46} = -\vec{v}_1 - \vec{v}_2, \\
\sum_{a_7 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_7} \vec{t}_e &= -\vec{t}_{57} = -\vec{v}_4, \\
\sum_{a_8 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_8} \vec{t}_e &= \vec{t}_{89} = \vec{v}_5, \\
\sum_{a_9 \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_9} \vec{t}_e &= -\vec{t}_{89} = -\vec{v}_5.
\end{aligned}$$

et on en conclut que

$$\begin{aligned}
w_M(g_{10}) &= \frac{1}{(2\pi)^{5d}} \int_{\mathbb{R}^{5d}} \widehat{F}(\vec{v}_1)^2 \widehat{F}(\vec{v}_2) \widehat{F}(\vec{v}_3) \widehat{F}(\vec{v}_4)^2 \widehat{F}(\vec{v}_5)^3 \widehat{F}(\vec{v}_1 + \vec{v}_2 - \vec{v}_3)^2 \cdot \\
&\quad \widehat{F}(\vec{v}_2 - \vec{v}_3) \widehat{F}(\vec{v}_1 + \vec{v}_2 - \vec{v}_4 + \vec{v}_5) \widehat{F}(\vec{v}_1 + \vec{v}_2) d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 d\vec{v}_3 d\vec{v}_4 d\vec{v}_5. \quad (6.23)
\end{aligned}$$

6.3.2 Particules dures (“hard spheres”) en dimension d

Par définition, le cas des particules dures en dimension d correspond à l’interaction

$$F(\vec{x}) = -\chi(\|\vec{x}\|_d \leq 1) = \begin{cases} -1, & \text{si } \|\vec{x}\|_d \leq 1, \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases} \quad (6.24)$$

où $\|\vec{x}\|_d$ désigne la norme du vecteur $\vec{x} \in \mathbb{R}^d$. On a le résultat suivant :

Proposition 35 La transformée de Fourier $\widehat{F}(\vec{t})$ de $F(\vec{x})$ est donnée par

$$\widehat{F}(\vec{t}) = - (2\pi)^{d/2} \frac{J_{d/2}(\|\vec{t}\|)}{\|\vec{t}\|^{d/2}}, \quad (6.25)$$

où $J_\alpha(z)$ est la fonction de Bessel d’ordre α définie par

$$J_\alpha(z) = \sum_{\nu \geq 0} \frac{(-1)^\nu}{\nu! \Gamma(\nu + \alpha + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2\nu + \alpha}. \quad (6.26)$$

Malgré que la formule (6.25) soit connue, nous en donnons une preuve détaillée par souci de complétude.

Preuve. Par la définition (6.8), on doit calculer

$$\widehat{F}(\vec{t}) = - \int_{\mathbb{R}^d} \chi(\|\vec{x}\| \leq 1) e^{-i(\vec{t} \cdot \vec{x})} d\vec{x}. \quad (6.27)$$

En effectuant le changement de variables dans \mathbb{R}^d par une rotation convenable, on peut toujours supposer que $\vec{t} = (\|\vec{t}\|, 0, 0, \dots, 0)$ et l'intégrale devient successivement

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \chi(\|\vec{x}\| \leq 1) e^{-i\|\vec{t}\|x_1} dx_1 \cdots dx_d &= \int_{\|\vec{x}\| \leq 1} e^{-i\|\vec{t}\|x_1} dx_1 \cdots dx_d \\ &= \int_{x_1^2 + \cdots + x_d^2 \leq 1} e^{-i\|\vec{t}\|x_1} dx_1 \cdots dx_d \\ &= \int_{-1}^1 \left[\int_{x_2^2 + \cdots + x_d^2 \leq 1 - x_1^2} 1 dx_2 \cdots dx_d \right] e^{-i\|\vec{t}\|x_1} dx_1 \\ &= \int_{-1}^1 \text{Vol}_{d-1}(\sqrt{1 - x_1^2}) e^{-i\|\vec{t}\|x_1} dx_1, \end{aligned} \quad (6.28)$$

où $\text{Vol}_{d-1}(r)$ désigne le volume de la boule de rayon r en dimension $d - 1$. Cependant, on dispose de la formule connue

$$\text{Vol}_d(r) = \frac{\pi^{\frac{d}{2}} r^d}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)}. \quad (6.29)$$

Donc

$$\begin{aligned} \widehat{F}(\vec{t}) &= - \int_{-1}^1 \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}} (1 - x_1^2)^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d-1}{2} + 1)} e^{-i\|\vec{t}\|x_1} dx_1 \\ &= - \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{\frac{d-1}{2}} e^{-i\|\vec{t}\|x} dx \\ &= - \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{\frac{d-1}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k i^k \|\vec{t}\|^k}{k!} x^k dx \\ &= - \frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k i^k \|\vec{t}\|^k}{k!} \int_{-1}^1 (1 - x^2)^{\frac{d-1}{2}} x^k dx. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Or, pour k impair, $\int_{-1}^1 (1-x^2)^{\frac{d-1}{2}} x^k dx = 0$. Donc il suffit de considérer seulement les termes où $k = 2\nu$ est pair. On obtient

$$\begin{aligned}\widehat{F}(\vec{t}) &= -\frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \|\vec{t}\|^{2\nu}}{(2\nu)!} \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\frac{d-1}{2}} x^{2\nu} dx \\ &= -\frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \|\vec{t}\|^{2\nu}}{(2\nu)!} \int_0^1 (1-u)^{\frac{d-1}{2}} u^{\nu-\frac{1}{2}} du \\ &= -\frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \|\vec{t}\|^{2\nu}}{(2\nu)!} B\left(\frac{d+1}{2}, \nu + \frac{1}{2}\right),\end{aligned}\quad (6.31)$$

où le changement de variable $u = x^2$ a été effectué et $B(\alpha, \beta)$ désigne la fonction Bêta d'Euler.

En utilisant la formule

$$B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)},\quad (6.32)$$

on obtient

$$\begin{aligned}\widehat{F}(\vec{t}) &= -\frac{\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma(\frac{d+1}{2})} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \|\vec{t}\|^{2\nu}}{(2\nu)!} \cdot \frac{\Gamma(\frac{d+1}{2})\Gamma(\nu + \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{d}{2} + \nu + 1)} \\ &= -\pi^{\frac{d-1}{2}} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \|\vec{t}\|^{2\nu}}{(2\nu)!} \cdot \frac{(\nu - \frac{1}{2})(\nu - \frac{3}{2}) \cdots \frac{1}{2}\Gamma(\frac{1}{2})}{(\frac{d}{2} + \nu)(\frac{d}{2} + \nu - 1) \cdots (\frac{d}{2} + 1)\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} \\ &= -\frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \|\vec{t}\|^{2\nu}}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots 2\nu \cdot (d+2)(d+4)(d+6) \cdots (d+2\nu)}.\end{aligned}\quad (6.33)$$

Mais par la définition (6.26) de $J_\alpha(z)$ avec $\alpha = \frac{d}{2}$, $z = \|\vec{t}\|$, on a

$$J_{\frac{d}{2}}(\|\vec{t}\|) = \frac{2^{-\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \|\vec{t}\|^{2\nu + \frac{d}{2}}}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots 2\nu \cdot (d+2)(d+4)(d+6) \cdots (d+2\nu)}.\quad (6.34)$$

Donc

$$\widehat{F}(\vec{t}) = -\frac{(2\pi)^{\frac{d}{2}}}{\|\vec{t}\|^{\frac{d}{2}}} J_{\frac{d}{2}}(\|\vec{t}\|).\quad (6.35)$$

■

Après calculs, la formule (6.12), dans le cas des particules dures, devient

$$w_M(c) = \frac{(-1)^{|c|}}{(2\pi)^{\frac{d}{2}(|c|-2k)}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d}}_{|c \setminus a|} \prod_{e \in c \setminus a} \frac{J_{d/2}(\|\vec{t}_e\|)}{\|\vec{t}_e\|^{d/2}} \prod_{\nu=1}^k \frac{J_{d/2}\left(\left\|\sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e\right\|\right)}{\left\|\sum_{a_\nu \prec e} \vec{t}_e - \sum_{e \prec a_\nu} \vec{t}_e\right\|^{d/2}} \prod_{e \in c \setminus a} d\vec{t}_e. \quad (6.36)$$

Exemple. (Le cas du cycle “Ring diagram” pour les particules dures) L’expression (6.18) pour $w_M(C_n)$ prend ici la forme

$$w_M(C_n) = \frac{(-1)^n}{(2\pi)^{\frac{d}{2}(-n+2)}} \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{J_{d/2}(\|\vec{t}\|)}{\|\vec{t}\|^{d/2}} \right)^n d\vec{t}. \quad (6.37)$$

En passant aux coordonnées hypersphériques, en posant $\vec{t} = r\vec{u}$, on obtient $d\vec{t} = r^{d-1}drds$ où ds est l’élément d’hypersurface de l’hypersphère unité $S_{d-1}(0,1)$ de dimension $d-1$. Alors, la formule (6.37) prend la forme

$$\begin{aligned} w_M(C_n) &= \frac{(-1)^n}{(2\pi)^{\frac{d}{2}(-n+2)}} \int_0^\infty \int_{S(0,1)} \left(\frac{J_{d/2}(r)}{r^{d/2}} \right)^n r^{d-1} dr ds \\ &= \frac{(-1)^n}{(2\pi)^{\frac{d}{2}(-n+2)}} \int_{S(0,1)} ds \int_0^\infty \left(\frac{J_{d/2}(r)}{r^{d/2}} \right)^n r^{d-1} dr \\ &= \frac{(-1)^n 2^{1-\frac{d}{2}} (2\pi)^{\frac{(n-1)d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \int_0^\infty \left(\frac{J_{d/2}(r)}{r^{d/2}} \right)^n r^{d-1} dr, \end{aligned} \quad (6.38)$$

puisque,

$$\begin{aligned} \int_{S(0,1)} ds &= \text{mesure de l’hypersurface à } d-1 \text{ dimensions de l’hypersphère unité} \\ &= \left(\frac{\pi^{\frac{d}{2}} r^d}{\Gamma\left(\frac{d}{2}+1\right)} \right)' \Big|_{r=1} \\ &= \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}. \end{aligned}$$

Remarquons que (6.38) est une intégrale unidimensionnelle tandis que (6.37) est multidimensionnelle. Cette simplification permet d'obtenir des valeurs exactes et asymptotiques pour $w_M(C_n)$.

Remarque 10 Pour les dimensions impaires $d = 1, 3, 5, \dots, 2p+1, \dots$ les fonctions $\frac{J_{d/2}(r)}{r^{d/2}}$ s'expriment à l'aide des fonctions trigonométriques (Abramowitz et Stegun, 1974) comme suit

$$\begin{aligned}
 \frac{J_{1/2}(r)}{r^{1/2}} &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin r}{r}, \\
 \frac{J_{3/2}(r)}{r^{3/2}} &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin r - r \cos r}{r^3}, \\
 \frac{J_{5/2}(r)}{r^{5/2}} &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(3 - r^2) \sin r - 3r \cos r}{r^5}, \\
 &\vdots \\
 \frac{J_{(2p+1)/2}(r)}{r^{(2p+1)/2}} &= (-1)^p \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^p \frac{\sin r}{r}, \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{6.39}$$

Ces formules découlent des l'identités (10.1.11) et (10.1.25) pages 438 et 439, de (Abramowitz et Stegun, 1974). Les intégrales (6.37) peuvent être évaluées par Maple sous formes closes pour $n > 1$. On peut remarquer que pour les dimensions impaires, d , le poids de Mayer du cycle est de la forme

$$w_M(C_n) = r_n(d) \pi^{\frac{(d-1)(n-1)}{2}}, \quad n > 1, \tag{6.40}$$

où $r_n(d)$ est un nombre rationnel, (voir table 6.1). Ce phénomène ne se produit pas pour les dimensions paires. La table 6.2 contient la valeur numérique de $w_M(C_n)$, pour les dimensions $d = 1, 2, \dots, 6$ et $n = 2, 3, \dots, 10$.

$n \backslash d$	1	3	5
2	2	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{8\pi^2}{15}$
3	-3	$-\frac{5\pi^2}{6}$	$-\frac{53\pi^4}{600}$
4	$\frac{16}{3}$	$\frac{2176\pi^3}{2835}$	$\frac{257024\pi^6}{10135125}$
5	$-\frac{115}{12}$	$-\frac{40949\pi^4}{54432}$	$-\frac{98733647\pi^8}{12108096000}$
6	$\frac{88}{5}$	$\frac{23648512\pi^5}{30405375}$	$\frac{3949166436352\pi^{10}}{1383524376609375}$
7	$-\frac{5887}{180}$	$-\frac{25040879363\pi^6}{30023136000}$	$-\frac{16585433845639430617\pi^{12}}{15628544345494080000000}$
8	$\frac{19328}{315}$	$\frac{35836384927744\pi^7}{38979295480125}$	$\frac{240426176843150906097664\pi^{14}}{582394938751963238073046875}$
9	$-\frac{259723}{2240}$	$-\frac{6060781370812815989\pi^8}{5854170457175040000}$	$-\frac{6433831256590210142724225656657\pi^{16}}{38676739168795978273959936000000000}$
10	$\frac{124952}{567}$	$\frac{430588656377655296\pi^9}{363092137397364375}$	$\frac{1484787480979909086547411592019968\pi^{18}}{21535317132022807570827565744376953125}$

Tableau 6.1 $w_M(C_n)$, $n = 2, 3, \dots, 10$ et $d = 1, 3, 5$

$n \backslash d$	1	2	3	4	5	6
2	2.0	3.141592654	4.188790204	4.934802202	5.263789015	5.167712783
3	-3.0	-5.788555832	-8.224670336	-9.247897168	-8.604469712	-6.828693801
4	5.333333333	14.25111586	23.79882119	27.81539997	24.38056721	16.79089136
5	-9.583333333	-36.36450811	-73.28051276	-91.36414574	-77.37279857	-47.39906204
6	17.60000000	96.35681264	238.0141732	321.5814979	267.3113193	147.9582733
7	-32.70555556	-261.6223444	-801.8493083	-1188.113273	-980.8594483	-496.4405527
8	61.35873016	723.6511608	2776.766216	4552.475974	3765.844446	1494.164653
9	-115.9477679	-2030.541697	-9823.409230	-17944.34554	-14976.75684	-4788.896265
10	220.3738977	5763.243822	35350.42136	72275.78788	61264.75979	16169.96990

Tableau 6.2 $w_M(C_n)$, $n = 2, 3, \dots, 10$ et $d = 1, 2, \dots, 6$

6.3.3 L'asymptotique du poids des cycles de particules dures en dimension d

Proposition 36 *Pour les particules dures en dimension d , le poids de Mayer du n -cycle satisfait asymptotiquement pour $n \rightarrow \infty$,*

$$w_M(C_n) \sim (-1)^n \left(\frac{d+2}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}d} \left(\frac{\pi^{\frac{1}{2}d}}{\Gamma(\frac{1}{2}d+1)} \right)^n n^{-\frac{1}{2}d}. \quad (6.41)$$

Plus précisément,

$$w_M(C_n) \sim (-1)^n \left(\frac{d+2}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}d} \left(\frac{\pi^{\frac{1}{2}d}}{\Gamma(\frac{1}{2}d+1)} \right)^n n^{-\frac{1}{2}d} \left(1 + \alpha_1(d) \frac{1}{n} + \alpha_2(d) \frac{1}{n^2} + \dots \right), \quad (6.42)$$

où

$$\alpha_1(d) = -\frac{d(d+2)}{4(d+4)}, \quad (6.43)$$

$$\alpha_2(d) = \frac{d(d+2)(d-2)(3d+10)}{96(d+4)(d+6)}. \quad (6.44)$$

Preuve. Nous allons d'abord transformer l'intégrale (6.37) sous la forme

$$\int_0^\infty e^{-nu^2} \varphi(u) du \quad (6.45)$$

où φ est développable en série, au voisinage de $u = 0$, et ensuite nous allons utiliser la méthode de Laplace qui consiste à intégrer terme à terme (6.45). Après calcul,

$$\frac{J_{d/2}(t)}{t^{d/2}} = \frac{1}{2^{d/2} \Gamma(\frac{d}{2}+1)} \left(1 + \sum_{m>0} \frac{(-1)^m t^{2m}}{m! 2^m (d+2) \cdots (d+2m)} \right). \quad (6.46)$$

Après simplification on obtient

$$w_M(C_n) = \frac{(-1)^n}{2^{d-1} \pi^{d/2} \Gamma(\frac{d}{2})} \beta_d^n \int_0^\infty \left(1 + \sum_{m>0} \frac{(-1)^m t^{2m}}{m! 2^m (d+2) \cdots (d+2m)} \right)^n t^{d-1} dt, \quad (6.47)$$

où $\beta_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}$ = volume de la boule unité en dimension d . Effectuons maintenant le changement de variables suivant au voisinage de $u = 0$,

$$1 + \sum_{m>0} \frac{(-1)^m t^{2m}}{m! 2^m (d+2) \cdots (d+2m)} = e^{-u^2}. \quad (6.48)$$

On résout ensuite à l'aide de Maple pour t en fonction de u et on obtient

$$t = \sqrt{2d+4} \cdot u \cdot \left(1 - \frac{u^2}{2(d+4)} - \frac{(11d+2)u^4}{24(d+6)(d+4)^2} + \dots \right), \quad (6.49)$$

$$dt = \sqrt{2d+4} \left(1 - \frac{3u^2}{2(d+4)} - \frac{5(11d+2)u^4}{24(d+6)(d+4)^2} + \dots \right) du. \quad (6.50)$$

En substituant (6.48), (6.49) et (6.50) dans notre intégrale (6.47), on obtient (en intégrant terme à terme) le résultat asymptotique annoncé. ■

Remarquons que la constante de croissance dans la formule asymptotique (6.42) est égale au volume de la boule unité de dimension d , c'est-à-dire,

$$\frac{\pi^{\frac{1}{2}d}}{\Gamma\left(\frac{1}{2}d+1\right)}. \quad (6.51)$$

Corollaire 6 (*Asymptotique pour les basses dimensions*) *En dimension $d = 1, 2, 3, 4$, on a pour $n \rightarrow \infty$,*

$$\begin{aligned} w_1(C_n) &\sim (-1)^n \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} 2^n n^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{3}{20} n^{-1} - \frac{13}{1120} n^{-2} + \dots\right), \\ w_2(C_n) &\sim (-1)^n \left(\frac{2}{\pi}\right) \pi^n n^{-1} \left(1 - \frac{1}{3} n^{-1} + \dots\right), \\ w_3(C_n) &\sim (-1)^n \left(\frac{5}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{4}{3\pi}\right)^n n^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{15}{28} n^{-1} + \frac{95}{2016} n^{-2} + \dots\right), \\ w_4(C_n) &\sim (-1)^n \left(\frac{9}{\pi^2}\right) \left(\frac{1}{2}\pi^2\right)^n n^{-2} \left(1 - \frac{3}{4} n^{-1} + \frac{11}{80} n^{-2} + \dots\right). \end{aligned} \quad (6.52)$$

Remarquons que le coefficient de $\frac{1}{n^2}$ donné par (6.44) contient le facteur $d-2$. Ceci explique le fait, qu'en dimension $d = 2$, le terme en $\frac{1}{n^2}$ n'existe pas dans le deuxième développement asymptotique de (6.52).

6.4 Algorithme de calcul pour les particules dures en dimension $d = 1$

6.4.1 Poids de Mayer dans le cas des particules dures en dimension $d = 1$ via les transformées de Fourier

Rappelons que l'interaction dans ce contexte est régie par la fonction

$$F(x) = f(|x|) = -\chi(|x| \leq 1) = \begin{cases} -1, & \text{si } |x| \leq 1, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.53)$$

La transformée de Fourier de cette fonction prend la forme

$$\widehat{F}(t) = -\frac{2 \sin t}{t}. \quad (6.54)$$

En effet,

$$\begin{aligned} \widehat{F}(t) &= -\int_{-\infty}^{\infty} \chi(|x| \leq 1) e^{-itx} dx \\ &= -\int_{-1}^1 e^{-itx} dx \\ &= -\frac{2 \sin t}{t}. \end{aligned} \quad (6.55)$$

On obtient immédiatement, en faisant appel à la formule générale (6.12),

$$w_M(c) = \frac{(-1)^{|c|}}{(2\pi)^{|c \setminus a|}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \cdots \int_{\mathbb{R}}}_{|c \setminus a|} \prod_{e \in c \setminus a} \frac{2 \sin t_e}{t_e} \prod_{\nu=1}^k \frac{2 \sin \left(\sum_{a_\nu < e} t_e - \sum_{e < a_\nu} t_e \right)}{\sum_{a_\nu < e} t_e - \sum_{e < a_\nu} t_e} \prod_{e \in c \setminus a} dt_e, \quad (6.56)$$

qui correspond bien au cas $d = 1$, dans la formule (6.36). En développant le produit dans (6.56), le poids de Mayer prend la forme,

$$w_M(c) = \int_{\mathbb{R}} \cdots \int_{\mathbb{R}} \frac{T(\dots, t_e, \dots)}{P(\dots, t_e, \dots)} \prod_{e \in c \setminus a} dt_e, \quad (6.57)$$

où $T(\dots, t_e, \dots)$ et $P(\dots, t_e, \dots)$ désignent respectivement un polynôme trigonométrique et un polynôme ordinaire dont les variables sont les t_e , où $e \in c \setminus a$. En renommant les variables, on a la forme suivante

$$w_M(c) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T(t_1, t_2, \dots, t_p)}{P(t_1, t_2, \dots, t_p)} dt_1 dt_2 \cdots dt_p, \quad p = |c \setminus a|. \quad (6.58)$$

Exemple. Dans le cas du graphe $K_4 \setminus e$ de la figure 6.5, l'intégrale (6.58) devient

$$w_M(c) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2 \sin t_1}{t_1}\right)^2 \left(\frac{2 \sin t_2}{t_2}\right)^2 \left(\frac{2 \sin(t_1 - t_2)}{t_1 - t_2}\right) dt_1 dt_2, \quad (6.59)$$

où les variables t_1 et t_2 correspondent respectivement aux arêtes 12 et 13. En intégrant successivement par rapport à t_1 puis t_2 ,

$$\begin{aligned} w_M(c) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2 \sin t_1}{t_1}\right)^2 \left(\frac{2 \sin t_2}{t_2}\right)^2 \left(\frac{2 \sin(t_1 - t_2)}{t_1 - t_2}\right) dt_1 dt_2 \\ &= \frac{4}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\sin t_2}{t_2}\right)^2 \left(\frac{1 - \cos t_2 + t_2 \sin t_2}{t_2^2}\right) dt_2 \\ &= \frac{14}{3}. \end{aligned} \quad (6.60)$$

Notons qu'en développant le numérateur dans l'intégrale (6.60), on obtient une expression plus générale qu'un polynôme trigonométrique puisque les coefficients des fonctions trigonométriques ne sont plus des constantes mais dépendent de la variable d'intégration. En effet, en développant $(\sin(t_2))^2 (1 - \cos(t_2) + t_2 \sin(t_2))$, on obtient

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{4} \cos(t_2) + \frac{3t_2}{4} \sin(t_2) - \frac{1}{2} \cos(2t_2) + \frac{1}{4} \cos(3t_2) - \frac{t_2}{4} \sin(3t_2). \quad (6.61)$$

Ce phénomène justifie la définition suivante.

Définition 16 *Un polynôme trigonométrique généralisé (PTG) est une somme finie,*

$$T(t_1, t_2, \dots) = \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots \in \mathbb{R}} c_{\nu_1, \nu_2, \dots}(t_1, t_2, \dots) e^{i(\nu_1 t_1 + \nu_2 t_2 + \dots)}, \quad (6.62)$$

où les coefficients $c_{\nu_1, \nu_2, \dots}(t_1, t_2, \dots)$ sont des polynômes complexes, les t_i sont des variables réelles et les indices ν_i sont des nombres réels.

Remarquons que $T(t_1, t_2, \dots)$ est à valeurs réelles si et seulement si

$$\forall \nu_1, \nu_2, \dots : \overline{c_{\nu_1, \nu_2, \dots}(t_1, t_2, \dots)} = c_{-\nu_1, -\nu_2, \dots}(t_1, t_2, \dots). \quad (6.63)$$

6.4.2 Outils de calcul pour les intégrales itérées

Afin d'implémenter de façon efficace le calcul des intégrales successives,

$$\begin{aligned} w_M(c) &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T(t_1, t_2, \dots, t_p)}{P(t_1, t_2, \dots, t_p)} dt_1 dt_2 \dots dt_p, \quad p = |c \setminus a|, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\dots \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{T(t_1, t_2, \dots, t_p)}{P(t_1, t_2, \dots, t_p)} dt_1 \right] dt_2 \right] \dots \right] dt_p, \end{aligned} \quad (6.64)$$

nous aurons besoin des concepts préliminaires suivants.

Définition 17 *L'adjoint d'un PTG réel à une variable*

$$T(t) = \sum_{\nu} c_{\nu}(t) e^{i\nu t} \quad \text{avec} \quad \overline{c_{\nu}(t)} = c_{-\nu}(t), \quad (6.65)$$

est le PTG réel

$$T^*(t) = \sum_{\nu} c_{\nu}^*(t) e^{i\nu t} \quad \text{où} \quad c_{\nu}^*(t) = i \operatorname{sgn}(\nu) c_{\nu}(t), \quad (6.66)$$

où sgn est la fonction « signe » définie par

$$\operatorname{sgn}(\nu) = \begin{cases} +1, & \text{si } \nu > 0, \\ 0, & \text{si } \nu = 0, \\ -1, & \text{si } \nu < 0. \end{cases} \quad (6.67)$$

Remarquons que si le PTG est écrit sous la forme standard,

$$T(t) = \frac{1}{2} a_0(t) + \sum_{\nu=1}^N a_{\nu}(t) \cos(\nu t) + b_{\nu}(t) \sin(\nu t), \quad (6.68)$$

alors,

$$T^*(t) = \sum_{\nu=1}^N b_{\nu}(t) \cos(\nu t) - a_{\nu}(t) \sin(\nu t). \quad (6.69)$$

Notons que le terme $\frac{1}{2} a_0(t)$ n'apparaît pas dans $T^*(t)$. De plus $T^*(t)$ est une généralisation de la notion d'adjoint d'un polynôme trigonométrique (à coefficients constants) introduite dans (Zygmund, 2002).

Définition 18 (*Différences divisées : cas de points distincts*) Soit f une fonction quelconque sur un intervalle contenant des nombres réels x_0, x_1, x_2, \dots , distincts. Les différences divisées par rapport à ces nombres sont définies récursivement par les formules

$$f[x_0] = f(x_0), \quad (6.70)$$

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}, \quad (6.71)$$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}, \quad (6.72)$$

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0}, \quad (6.73)$$

⋮

Il est possible de démontrer par induction que

$$f[x_0, \dots, x_n] = \sum_{j=0}^n \frac{f(x_j)}{\prod_{k \neq j} (x_j - x_k)}. \quad (6.74)$$

Définition 19 (*Différences divisées : cas des points répétés – confluence*) Soit f une fonction quelconque sur un intervalle contenant des nombres réels x_0, x_1, \dots, x_n distincts. Supposons que f est dérivable $m_i - 1$ fois au point x_i . En désignant par

$$x_i^{m_i} := x_i, x_i, \dots, x_i \text{ (} m_i \text{ fois)}, \quad (6.75)$$

le point x_i répété m_i fois, la différence divisée $f[x_0^{m_0}, \dots, x_n^{m_n}]$ est définie par

$$f[x_0^{m_0}, \dots, x_n^{m_n}] = \frac{1}{(m_0 - 1)!} \left(\frac{\partial}{\partial x_0} \right)^{m_0 - 1} \cdots \frac{1}{(m_n - 1)!} \left(\frac{\partial}{\partial x_n} \right)^{m_n - 1} f[x_0, \dots, x_n]. \quad (6.76)$$

Cette dernière définition est motivée par le fait (démontrable par induction) que lorsque f est analytique dans un ouvert simplement connexe dont la frontière Γ est orienté positivement contenant

les points x_0, \dots, x_n , alors

$$f[x_0, \dots, x_n] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(z)}{(z-x_0)\cdots(z-x_n)} dz. \quad (6.77)$$

En dérivant sous le signe d'intégration on trouve alors que

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(z)}{(z-x_0)^{m_0}\cdots(z-x_n)^{m_n}} dz \quad (6.78)$$

est égal à

$$\frac{1}{(m_0-1)!} \left(\frac{\partial}{\partial x_0} \right)^{m_0-1} \cdots \frac{1}{(m_n-1)!} \left(\frac{\partial}{\partial x_n} \right)^{m_n-1} \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f(z)}{(z-x_0)\cdots(z-x_n)} dz. \quad (6.79)$$

Exemple. Soient a, b, c trois nombres réels distincts. Alors

$$\begin{aligned} f[a, a, a, b, b, c] &= \left(\frac{2}{(a-b)^3(a-c)^2} + \frac{1}{(a-b)^2(a-c)^3} + \frac{3}{(a-b)^4(a-c)} \right) f(a) \\ &+ \left(\frac{-1}{(a-b)^2(a-c)^2} + \frac{-2}{(a-b)^3(a-c)} \right) \frac{\partial}{\partial a} f(a) \\ &+ \frac{1/2}{(a-b)^2(a-c)} \frac{\partial^2}{\partial a^2} f(a) \\ &+ \left(\frac{-1}{(b-a)^3(b-c)^2} + \frac{-3}{(b-a)^4(b-c)} \right) f(b) \\ &+ \frac{1}{(b-a)^3(b-c)} \frac{\partial}{\partial b} f(b) \\ &+ \frac{1}{(c-a)^3(c-b)^2} f(c). \end{aligned} \quad (6.80)$$

Le lemme suivant va nous permettre de calculer efficacement les intégrales successives (6.64).

Lemme 8 (d'intégration) *Considérons un polynôme trigonométrique généralisé*

$$T(t) = \sum_{\nu} c_{\nu}(t) e^{i\nu t} \quad \text{avec} \quad \overline{c_{\nu}(t)} = c_{-\nu}(t), \quad (6.81)$$

ainsi qu'un polynôme ordinaire

$$P(t) = (t-\tau_0)^{m_0} \cdots (t-\tau_n)^{m_n} \quad \text{où} \quad \max_{\nu} \deg(c_{\nu}(t)) < \deg(P(t)). \quad (6.82)$$

ayant seulement des racines réelles τ_0, \dots, τ_n de multiplicité respectives m_0, \dots, m_n . Supposons que $T(t)/P(t)$ est continue sur l'axe réel (c'est-à-dire que τ_i est une racine de $T(t)$ de multiplicité $\geq m_i$ pour $i = 0, \dots, n$). Alors

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{T(t)}{P(t)} dt = \pi T^*[\tau_0^{m_0}, \dots, \tau_n^{m_n}]. \quad (6.83)$$

Dans le cas particulier où $\max_{\nu} \deg(c_{\nu}(t)) = \deg(P(t)) - 1$, l'intégrale (6.83) est prise au sens de la valeur principale de Cauchy :

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R \frac{T(t)}{P(t)} dt. \quad (6.84)$$

Preuve. Considérons les deux fonctions analytiques auxiliaires suivantes de la variable complexe z ,

$$U(z) = T(z) - iT^*(z) = c_0(z) + 2 \sum_{\nu > 0} c_{\nu}(z) e^{i\nu z}, \quad (6.85)$$

et

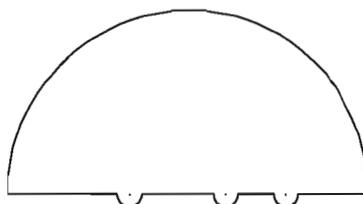
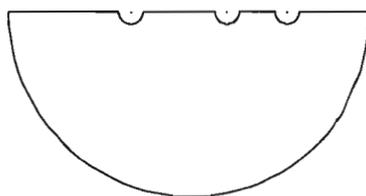
$$V(z) = T(z) + iT^*(z) = c_0(z) - 2 \sum_{\nu < 0} c_{\nu}(z) e^{i\nu z}, \quad (6.86)$$

de sorte que $\frac{1}{2}(U(z) + V(z)) = T(z)$.

Soit R un réel positif tel que

$$-R < \tau_0, \dots, \tau_n < R. \quad (6.87)$$

Soit Γ^+ le contour parcouru dans le sens positif, décrit par la figure 6.6, qui englobe tous les τ_i et qui est formé d'un grand demi-cercle de rayon R du demi-plan supérieur et d'un diamètre $[-R, R]$ sur l'axe réel déformé par des petits demi-cercles du demi-plan inférieur de rayon ϵ centrés aux points τ_i . Le contour Γ^+ contient donc tous les points τ_i . Soit Γ^- le contour analogue parcouru dans le sens négatif (voir figure 6.7) dans le demi-plan inférieur mais qui exclut les points τ_i .

Figure 6.6 Contour Γ^+ Figure 6.7 Contour Γ^-

Puisque Γ^- exclut les pôles de $\frac{V(z)}{P(z)}$, on a par le théorème de Cauchy

$$\int_{\Gamma^-} \frac{V(z)}{P(z)} dz = 0. \quad (6.88)$$

Grâce au théorème des résidus et des formules (6.77) à (6.79), on les égalités suivantes

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma^+} \frac{U(z)}{P(z)} dz &= \int_{\Gamma^+} \frac{T(z) - iT^*(z)}{(z - \tau_0)^{m_0} \dots (z - \tau_n)^{m_n}} dz \\ &= \int_{\Gamma^+} \frac{T(z)}{(z - \tau_0)^{m_0} \dots (z - \tau_n)^{m_n}} dz - i \int_{\Gamma^+} \frac{T^*(z)}{(z - \tau_0)^{m_0} \dots (z - \tau_n)^{m_n}} dz \\ &= 0 - i \int_{\Gamma^+} \frac{T^*(z)}{(z - \tau_0)^{m_0} \dots (z - \tau_n)^{m_n}} dz \\ &= 2\pi \cdot \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma^+} \frac{T^*(z)}{(z - \tau_0)^{m_0} \dots (z - \tau_n)^{m_n}} dz \\ &= 2\pi T^*[\tau_0^{m_0}, \dots, \tau_n^{m_n}]. \end{aligned} \quad (6.89)$$

Ces intégrales sont indépendantes de R lorsque R satisfait (6.87). On a alors, pour $R \rightarrow \infty$ et $\epsilon \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{T(t)}{P(t)} dt &= \frac{1}{2} \lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int_{\Gamma^+} \frac{U(z)}{P(z)} dz + \frac{1}{2} \lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int_{\Gamma^-} \frac{V(z)}{P(z)} dz \\ &= \frac{1}{2} \cdot 2\pi T^*[\tau_0^{m_0}, \dots, \tau_n^{m_n}] + \frac{1}{2} \cdot 0 \\ &= \pi T^*[\tau_0^{m_0}, \dots, \tau_n^{m_n}], \end{aligned} \quad (6.90)$$

puisque les intégrales sur les demi-circonférences de Γ^+ et de Γ^- tendent toutes vers 0. En effet, si $z \in \Gamma^+$, alors $\text{Im}(z) \geq 0$ et on a

$$\begin{aligned} \left| \frac{U(z)}{P(z)} \right| &= \left| \frac{c_0(z)}{P(z)} + 2 \sum_{\nu > 0} \frac{c_\nu(z)}{P(z)} e^{i\nu z} \right| \\ &\leq \left| \frac{c_0(z)}{P(z)} \right| + 2 \sum_{\nu > 0} \left| \frac{c_\nu(z)}{P(z)} \right|. \end{aligned} \quad (6.91)$$

Remarquons que (6.91) tend vers 0 lorsque $R \rightarrow \infty$ à cause de (6.82). De façon semblable

$$\left| \frac{U(z)}{P(z)} \right| \rightarrow 0 \quad \text{lorsque } z \in \Gamma^- \quad \text{et } R \rightarrow 0.$$

De plus les intégrales sur les petites demi-circonférences tendent aussi vers 0 par continuité de $\frac{T(z)}{P(z)}$. ■

On trouve en appendice B diverses procédures en Maple qui implémentent la méthode de Fourier et la méthode d'intégration du lemme 8 pour le calcul du poids de Mayer. La procédure principale `wMayer` prend en entrée les deux paramètres a et ca où a est une arborescence couvrante d'un graphe connexe c donnée sous la forme d'une liste

$$a = [\alpha(1), \alpha(2), \dots, \alpha(k)], \quad \alpha(i) < i, \quad (6.92)$$

et son complémentaire ca est donné par

$$ca = c \setminus a = [\{i, j\} | \{i, j\} \text{ arête de } c \text{ non présente dans } a]. \quad (6.93)$$

Pour le graphe $c = K_4 \setminus e$ donné par la figure 6.5, on a

$$a := [0, 0, 0], \quad ca := [\{1, 3\}, \{2, 3\}]. \quad (6.94)$$

En exécutant la procédure, on obtient directement

$$w_{\text{Mayer}}(a, ca) = \frac{14}{3}. \quad (6.95)$$

Remarque 11 On peut accélérer le calcul en utilisant dans le lemme 8 la fonction auxiliaire

$$U(z) = T(z) - iT^*(z) = c_0(z) + 2 \sum_{\nu > 0} c_\nu(z) e^{i\nu z}, \quad (6.96)$$

plutôt que $T^*(z)$. En effet, on peut vérifier que

$$\pi T^*[\tau_0^{m_0}, \dots, \tau_n^{m_n}] = i\pi U[\tau_0^{m_0}, \dots, \tau_n^{m_n}], \quad (6.97)$$

et $U(z)$ contient environ deux fois moins de termes que $T^*(z)$.

6.4.2.1 Le poids de Mayer de la roue

On s'intéresse au calcul du poids de Mayer de la roue $\text{Roue}[k]$ (voir figure 6.8), définie par

$$\text{Roue}[k] = \{\{0, 1\}, \{0, 2\}, \dots, \{0, k\}, \{1, 2\}, \{2, 3\}, \dots, \{k-1, k\}, \{1, k\}\}, \quad (6.98)$$

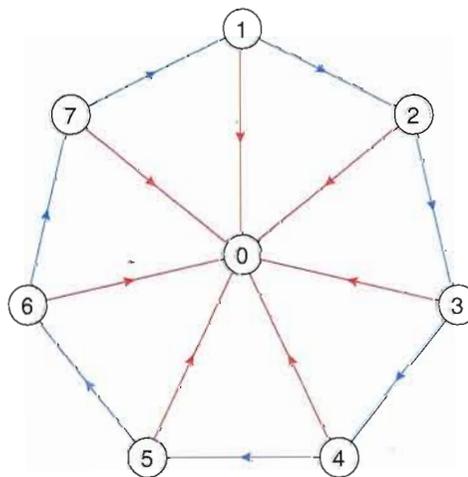


Figure 6.8 Roue[7]

En choisissant l'arborescence couvrante

$$a = [0, 0, \dots, 0], \quad (6.99)$$

on a que son complémentaire est

$$ca = [\{1, 2\}, \{2, 3\}, \dots, \{k-1, k\}, \{1, k\}]. \quad (6.100)$$

Le poids de Mayer de la roue est donné par l'intégrale suivante :

$$w_M(\text{Roue}[k]) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^k \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \dots \int_{\mathbb{R}}}_k \prod_{\nu=1}^k \frac{\sin(t_\nu)}{t_\nu} \cdot \frac{\sin(t_\nu - t_{\nu+1})}{t_\nu - t_{\nu+1}} dt_1 \dots dt_k, \quad (6.101)$$

où $t_{k+1} = t_1$. En utilisant la procédure wMayer pour $k = 3, 4, \dots, 24$, on obtient la table 6.3.

k	$w_M(\text{Roue}[k])$ (en décimale)	$w_M(\text{Roue}[k])$ (valeur exacte)
3	4.0	4
4	6.0	6
5	9.166666667	$\frac{55}{6}$
6	14.15000000	$\frac{283}{20}$
7	21.927777778	$\frac{3947}{180}$
8	34.03690476	$\frac{28591}{840}$
9	52.86855159	$\frac{106583}{2016}$
10	82.14191468	$\frac{1655981}{20160}$
11	127.6384116	$\frac{115793567}{907200}$
12	198.3435623	$\frac{1319540051}{6652800}$
13	308.2216074	$\frac{1476386431}{4790016}$
14	478.9734434	$\frac{497096265803}{1037836800}$
15	744.3225452	$\frac{1474744718017}{1981324800}$
16	1156.675350	$\frac{1037417494677}{896896000}$
17	1797.471526	$\frac{1880405953796927}{1046139494400}$
18	2793.268307	$\frac{165588403358594863}{59281238016000}$
19	4340.735540	$\frac{6947752771260710807}{1600593426432000}$
20	6745.497979	$\frac{136759463170415948971}{20274183401472000}$
21	10482.49617	$\frac{1275144299246269256099}{121645100408832000}$
22	16289.78720	$\frac{46236698660342351057041}{2838385676206080000}$
23	25314.31096	$\frac{7113325986212042949799427}{281000181944401920000}$
24	39338.41076	$\frac{169496208920787363880503431}{4308669456480829440000}$

Tableau 6.3 $w_M(\text{Roue}[k])$, $k = 3, 4, \dots, 24$

Remarque 12 *Le polynôme d'Ehrhart aurait exigé*

$$153146104987465308849377365924814648135545 \text{ points} \quad (6.102)$$

pour le calcul de w_M (Roue[24]). Ce qui démontre l'efficacité de notre utilisation des transformées de Fourier dans ce cas particulier.

6.4.2.2 Le poids de Mayer des roues généralisées

Considérons maintenant des "roues généralisées", c'est-à-dire des roues dont les rayons et les arcs sous-tendus par ces rayons sont de longueurs variables. La figure 6.9 décrit une roue généralisée associée aux arcs successifs de longueur $(4, 3, 4, 3, 2)$ et dont les rayons correspondants sont de longueurs $(4, 3, 2, 3, 1)$. En notant par $\text{RoueGen}[\vec{\alpha}, \vec{r}]$ la roue généralisée dont les arcs (resp. rayons) successifs sont de longueurs $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_k)$ ($\vec{r} = (r_1, \dots, r_k)$), on vérifie facilement que l'intégrale (6.101) se généralise comme suit

$$w_M(\text{RoueGen}[\vec{\alpha}, \vec{r}]) = \frac{1}{(2\pi)^k} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \dots \int_{\mathbb{R}}}_k \prod_{\nu=1}^k \left(\frac{2 \sin(t_\nu)}{t_\nu} \right)^{\alpha_\nu} \left(\frac{2 \sin(t_\nu - t_{\nu+1})}{t_\nu - t_{\nu+1}} \right)^{r_\nu} dt_1 \dots dt_k, \quad (6.103)$$

où $t_{k+1} = t_1$.

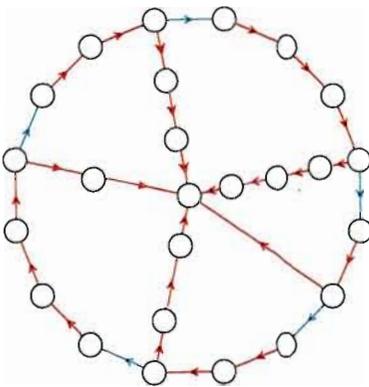


Figure 6.9 $\text{RoueGen}[[4, 3, 4, 3, 2], [4, 3, 2, 3, 1]]$

6.4.2.3 Le poids de Mayer des échelles

Intéressons-nous maintenant au calcul du poids de Mayer de l'échelle Échelle[k] à k "marches", définie par

$$\begin{aligned} \text{Echelle}[k] = & \{ \{0, 1\}, \{2, 3\}, \dots, \{2k-2, 2k-1\}, \{0, 2\}, \{2, 4\}, \dots, \{2(k-2), 2(k-1)\}, \\ & \{1, 3\}, \{3, 5\}, \dots, \{2k-3, 2k-1\} \}, \end{aligned} \quad (6.104)$$

(voir figure 6.10 pour $k = 5$).

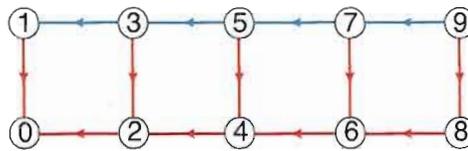


Figure 6.10 Échelle[5]

En utilisant l'arborescence couvrante

$$a = [0, 0, 2, 2, 4, 4, \dots, 2(k-2), 2(k-2), 2(k-1)], \quad (6.105)$$

et son complémentaire

$$ca = [\{1, 3\}, \{3, 5\}, \{5, 7\}, \dots, \{2k-3, 2k-1\}], \quad (6.106)$$

le poids de Mayer de l'échelle est donné par l'intégrale suivante :

$$\begin{aligned} w_M(\text{Echelle}[k]) = & \frac{(-1)^{k-1} 2^{2k-1}}{\pi^{k-1}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \dots \int_{\mathbb{R}}}_{k-1} \left(\frac{\sin(t_{13})}{t_{13}} \cdot \frac{\sin(t_{2k-3, 2k-1})}{t_{2k-3, 2k-1}} \right)^3 \cdot \\ & \prod_{\nu=1}^{k-2} \frac{\sin(t_{2\nu-1, 2\nu+1} - t_{2\nu+1, 2\nu+3})}{t_{2\nu-1, 2\nu+1} - t_{2\nu+1, 2\nu+3}} \cdot \\ & \prod_{\nu=2}^{k-2} \left(\frac{\sin(t_{2\nu-1, 2\nu+1})}{t_{2\nu-1, 2\nu+1}} \right)^2 dt_{13} dt_{35} \dots dt_{2k-3, 2k-1}. \end{aligned} \quad (6.107)$$

En utilisant la procédure wMayer, pour $k = 2, 3, \dots, 20$, on obtient la table 6.4.

k	$w_M(\text{Échelle}[k])$ (en décimale)	$w_M(\text{Échelle}[k])$ (valeur exacte)
2	5.333333333	$\frac{16}{3}$
3	14.40000000	$\frac{72}{5}$
4	38.90793651	$\frac{12256}{315}$
5	105.1315697	$\frac{298048}{2835}$
6	284.0725734	$\frac{14764672}{51975}$
7	767.5833368	$\frac{933546368}{1216215}$
8	2074.062197	$\frac{1324315416064}{638512875}$
9	5604.256622	$\frac{4055508675584}{723647925}$
10	15143.08121	$\frac{2555266827321344}{168741538875}$
11	40917.63174	$\frac{7974702290308665344}{194896477400625}$
12	110562.2141	$\frac{31881234351921577984}{288355606914375}$
13	298746.5957	$\frac{1104812907301148689235968}{3698160658676859375}$
14	807233.5489	$\frac{55149108044735779236708352}{68318652168188296875}$
15	2181199.758	$\frac{191585710883255857168182050816}{87835013804234087015625}$
16	5893749.575	$\frac{722160217529445224617619316146176}{122529844256906551386796875}$
17	15925310.79	$\frac{1839821516916884536040718194180096}{115528138870797605593265625}$
18	43031269.08	$\frac{34509263203842056512945018560321683456}{801957830661453378826585546875}$
19	116273405.5	$\frac{18630624326238458850642363567304189411328}{160231174566158385089551792265625}$
20	314178621.8	$\frac{186514181556505748669571924547787711863324672}{593656501767616816756789390344140625}$

Tableau 6.4 $w_M(\text{Échelle}[k])$, $k = 2, 3, \dots, 20$

CONCLUSION

Les liens entre la mécanique statistique et la combinatoire sont de plus en plus nombreux comme on l'a vu dans ce travail.

Dans cette thèse, après avoir rappelé la théorie de Mayer au chapitre 1, nous avons présenté au chapitre 2 l'approche de Ree-Hoover qui permet d'exprimer les coefficients du développement du viriel via des poids spéciaux associées aux graphes 2-connexes. Les coefficients de ce développement sont appelés star content dont nous avons donné des formules explicites et certaines propriétés combinatoires et relations de récurrence ainsi que des relations entre les deux poids. Au chapitre 3, nous nous sommes surtout placés dans le contexte des gaz à noyaux durs en dimension un en adaptant la méthode des homomorphismes de graphes au calcul des poids de Ree-Hoover et développé un algorithme de type Monte-Carlo basé sur la donnée d'une arborescence couvrante. À partir de diverses tables que nous avons construites donnant les poids de Mayer et de Ree-Hoover de tous les graphes 2-connexes jusqu'à la taille 8, nous avons conjecturé diverses formules explicites pour les poids de graphes appartenant à diverses familles infinies de graphes simplement, doublement et triplement indexés par des entiers. Ces formules ont été démontrées au chapitre 4 par la méthode des homomorphismes de graphes pour le poids de Ree-Hoover et par les relations entre les deux poids pour le poids de Mayer. Au chapitre 5, toujours dans le cas des particules dures, une formule explicite du poids de Mayer des graphes bipartis complets a été présentée et établie de deux façons : par l'évaluation de l'intégrale définissant le poids de Mayer ainsi que par l'utilisation d'arrangements spéciaux de points provenant de la méthode des homomorphismes de graphes. En utilisant le théorème 1, nous avons montré que le poids de Ree-Hoover des graphes bipartis compltes $K_{m,n}$ ($m, n > 1$) est cependant nul. Nous avons aussi montré, par des exemples, que les poids de Mayer et de Ree-Hoover sont "indépendants" de certains paramètres classiques de la théorie des graphes.

Au dernier chapitre, nous avons effectué un changement de variables basé sur les arborescences couvrantes pour réécrire systématiquement le poids de Mayer à l'aide des transformées de Fourier dans le cas multidimensionnel pour des interactions quelconques. Des tables et formules exactes ou asymptotiques pour des graphes particuliers en ont résulté. De plus, nous avons décrit un algorithme efficace de calcul des intégrales de Fourier pour les poids de Mayer dans le cas des particules dures en dimension un.

Ces développements ouvrent la voie à plusieurs perspectives de recherches futures. Citons par exemple, l'extension du calcul exact des poids $w_M(K_n \setminus g)$ et $w_{RH}(K_n \setminus g)$ pour d'autres graphes fixes g , le calcul du poids de Mayer pour les graphes multipartis complets, des modifications de la méthode des homomorphismes de graphes la rendant plus efficace sont aussi envisageables, trouver de nouvelles formules explicites donnant les poids de Mayer et Ree-Hoover à partir de certains paramètres de la théorie des graphes, développer plus à fond la méthode des transformées de Fourier pour répondre notamment à certaines questions liées au développement asymptotique des poids de Mayer et de Ree-Hoover : par exemple, quel est le comportement asymptotique de la roue et de l'échelle

$$w_M(\text{Roue}[k]) \sim ? \text{ lorsque } k \rightarrow \infty,$$

$$w_M(\text{Échelle}[k]) \sim ? \text{ lorsque } k \rightarrow \infty,$$

dans le cas des particules dures en dimension un.

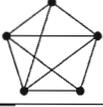
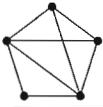
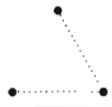
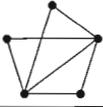
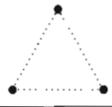
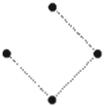
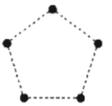
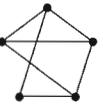
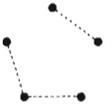
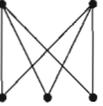
APPENDICE A

GRAPHES 2-CONNEXES DE TAILLE ≤ 7

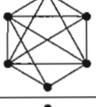
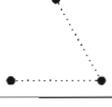
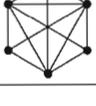
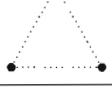
Avec 4 sommets :

Numéro	Graphe g	Graphe \bar{g}	$\bar{a}(g)$	$\ell(g)$	$\bar{a}(g) \cdot \ell(g)$	$\frac{1-n}{n!} \cdot \bar{a}(g) \cdot \ell(g)$	w_M	w_{RH}
4.0.1		\emptyset	-2	1	-2	$\frac{1}{4}$	4	4
4.2.1			0	6	0	0	$\frac{14}{3}$	$\frac{2}{3}$
4.4.1			1	3	3	$-\frac{3}{8}$	$\frac{16}{3}$	0

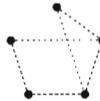
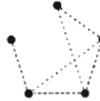
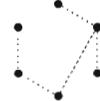
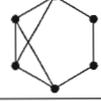
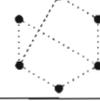
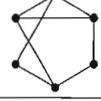
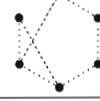
Avec 5 sommets :

Numéro	Graphe g	Graphe \bar{g}	$\bar{a}(g)$	$\ell(g)$	$\bar{a}(g) \cdot \ell(g)$	$\frac{1-n}{n!} \cdot \bar{a}(g) \cdot \ell(g)$	w_M	w_{RH}
5.0.1		\emptyset	-6	1	-6	$\frac{1}{5}$	5	5
5.2.1			0	10	0	0	$\frac{11}{2}$	$\frac{1}{2}$
5.3.1			0	30	0	0	$\frac{19}{3}$	$\frac{1}{3}$
5.3.2			0	10	0	0	$\frac{15}{2}$	0
5.4.1			0	60	0	0	$\frac{29}{4}$	$\frac{1}{12}$
5.4.2			3	15	45	$-\frac{3}{2}$	6	0
5.5.1			0	60	0	0	$\frac{49}{6}$	0
5.5.2			1	12	12	$-\frac{2}{5}$	$\frac{115}{12}$	0
5.5.3			-2	30	-60	2	$\frac{41}{6}$	0
5.5.4			1	10	10	$-\frac{1}{3}$	8	0

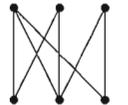
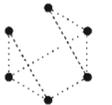
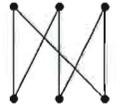
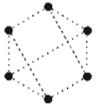
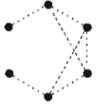
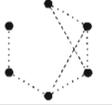
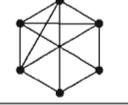
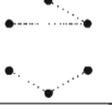
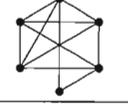
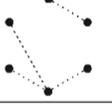
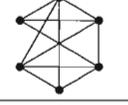
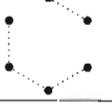
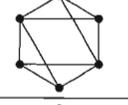
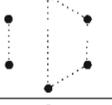
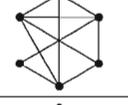
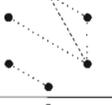
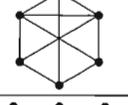
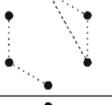
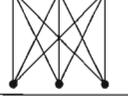
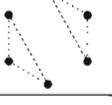
Avec 6 sommets :

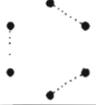
Numéro	Graphe g	Graphe \bar{g}	$\bar{a}(g)$	$\ell(g)$	$\frac{\bar{a}(g) \cdot \ell(g)}{\ell(g)}$	$\frac{\bar{a}(g) \cdot \ell(g)}{\ell(g)}$	w_M	w_{RH}
6.0.1		\emptyset	24	1	24	$-\frac{1}{6}$	6	6
6.2.1			0	15	0	0	$\frac{32}{5}$	$\frac{2}{5}$
6.3.1			0	60	0	0	7	$\frac{1}{5}$
6.3.2			0	20	0	0	$\frac{39}{5}$	0

6.4.1			0	60	0	0	8	$\frac{1}{5}$
6.4.2			0	180	0	0	$\frac{229}{30}$	$\frac{1}{30}$
6.4.3			0	45	0	0	$\frac{26}{3}$	$\frac{2}{15}$
6.4.4			0	180	0	0	$\frac{133}{15}$	0
6.4.5			0	90	0	0	$\frac{31}{3}$	0
6.4.6			0	15	0	0	$\frac{62}{5}$	0
6.4.7			-12	45	-540	$\frac{15}{4}$	$\frac{34}{5}$	0
6.5.1			0	360	0	0	$\frac{87}{10}$	$\frac{1}{30}$
6.5.2			0	360	0	0	$\frac{124}{15}$	0
6.5.3			-4	72	-288	2	$\frac{55}{6}$	0
6.5.4			0	360	0	0	$\frac{59}{6}$	$\frac{1}{30}$
6.5.5			0	360	0	0	$\frac{301}{30}$	0
6.5.6			0	360	0	0	$\frac{287}{30}$	0

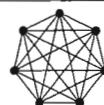
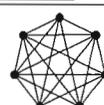
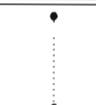
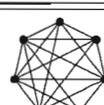
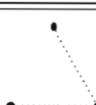
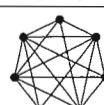
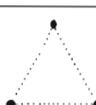
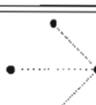
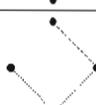
6.5.7			0	360	0	0	$\frac{169}{15}$	0
6.5.8			0	360	0	0	$\frac{349}{30}$	0
6.5.9			8	180	1440	-10	$\frac{37}{5}$	0
6.5.10			-4	60	-240	$\frac{5}{3}$	$\frac{41}{5}$	0
6.6.1			0	90	0	0	10	$\frac{2}{15}$
6.6.2			0	360	0	0	$\frac{28}{3}$	0
6.6.3			0	360	0	0	$\frac{47}{5}$	0
6.6.4			-1	360	-360	$\frac{5}{2}$	$\frac{89}{10}$	0
6.6.5			4	60	240	$-\frac{5}{3}$	$\frac{49}{5}$	0
6.6.6			3	360	1080	$-\frac{15}{2}$	$\frac{103}{10}$	0
6.6.7			-2	180	-360	$\frac{5}{2}$	$\frac{361}{30}$	0
6.6.8			-2	360	-720	5	$\frac{117}{10}$	0

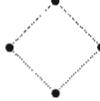
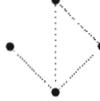
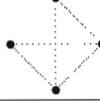
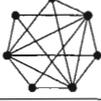
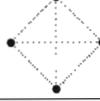
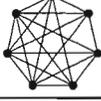
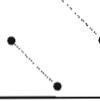
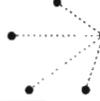
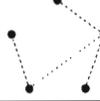
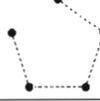
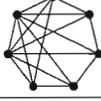
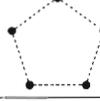
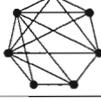
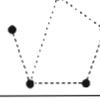
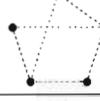
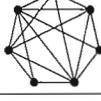
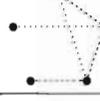
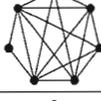
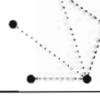
6.6.9			0	180	0	0	11	0
6.6.10			0	360	0	0	$\frac{169}{15}$	$\frac{1}{30}$
6.6.11			0	360	0	0	$\frac{158}{15}$	0
6.6.12			0	180	0	0	$\frac{188}{15}$	0
6.6.13			0	120	0	0	$\frac{113}{10}$	0
6.6.14			0	720	0	0	$\frac{161}{15}$	0
6.6.15			0	180	0	0	$\frac{163}{15}$	0
6.6.16			1	360	360	$-\frac{5}{2}$	$\frac{51}{5}$	0
6.6.17			-1	90	-90	$\frac{5}{8}$	$\frac{176}{15}$	0
6.6.18			0	360	0	0	$\frac{188}{15}$	0
6.6.19			0	720	0	0	$\frac{127}{10}$	0
6.6.20			0	360	0	0	$\frac{439}{30}$	0

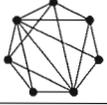
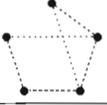
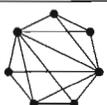
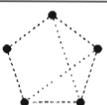
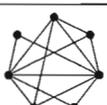
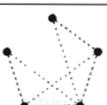
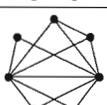
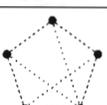
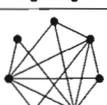
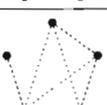
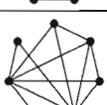
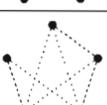
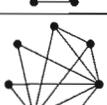
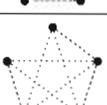
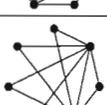
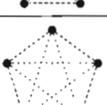
6.6.21			0	180	0	0	$\frac{72}{5}$	0
6.6.22			1	60	60	$-\frac{5}{12}$	$\frac{88}{5}$	0
6.6.23			0	180	0	0	$\frac{194}{15}$	0
6.6.24			0	360	0	0	$\frac{37}{3}$	0
6.6.25			1	180	180	$-\frac{5}{4}$	$\frac{419}{30}$	0
6.6.26			-4	90	-360	$\frac{5}{2}$	8	0
6.6.27			-6	60	-360	$\frac{5}{2}$	$\frac{42}{5}$	0
6.6.28			-5	180	-900	$\frac{25}{4}$	$\frac{241}{30}$	0
6.6.29			4	45	180	$-\frac{5}{4}$	$\frac{136}{15}$	0
6.6.30			3	180	540	$-\frac{15}{4}$	$\frac{139}{15}$	0
6.6.31			0	60	0	0	$\frac{44}{5}$	0
6.6.32			4	10	40	$-\frac{5}{18}$	$\frac{48}{5}$	0

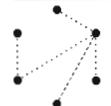
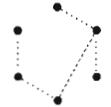
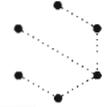
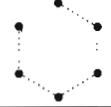
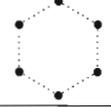
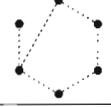
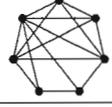
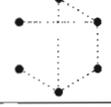
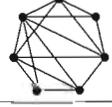
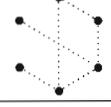
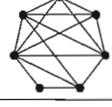
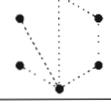
6.6.33			-2	90	-180	$\frac{5}{4}$	$\frac{161}{15}$	0
6.6.34			1	15	15	$-\frac{5}{48}$	$\frac{64}{5}$	0
6.6.35			16	15	240	$-\frac{5}{3}$	$\frac{36}{5}$	0

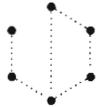
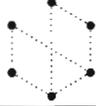
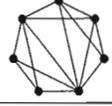
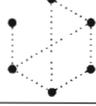
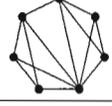
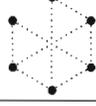
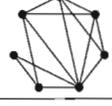
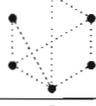
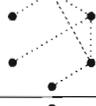
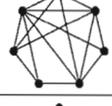
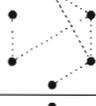
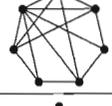
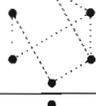
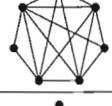
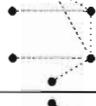
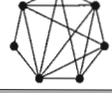
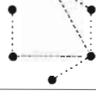
Avec 7 sommets :

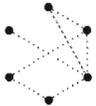
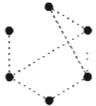
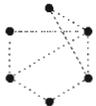
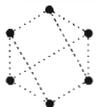
Numéro	Graphe g	Graphe \bar{g}	$\bar{a}(g)$	$\ell(g)$	$\frac{\bar{a}(g) \cdot \ell(g)}{\bar{a}(g) \cdot \ell(g)}$	$\frac{1-n}{n!} \cdot \frac{\bar{a}(g)}{\ell(g)}$	w_M	w_{RH}
7.0.1		\emptyset	120	1	120	$-\frac{1}{7}$	7	7
7.2.1			0	21	0	0	$\frac{22}{3}$	$\frac{1}{3}$
7.3.1			0	105	0	0	$\frac{39}{5}$	$\frac{2}{15}$
7.3.2			0	35	0	0	$\frac{42}{5}$	0
7.4.1			0	140	0	0	$\frac{17}{2}$	$\frac{1}{10}$
7.4.2			0	420	0	0	$\frac{497}{60}$	$\frac{1}{60}$

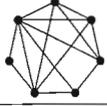
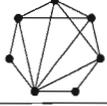
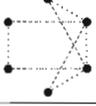
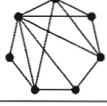
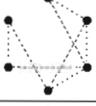
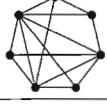
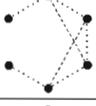
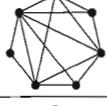
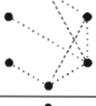
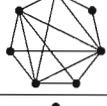
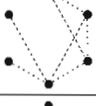
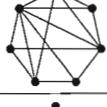
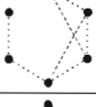
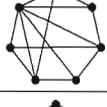
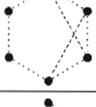
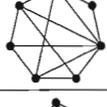
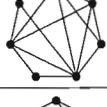
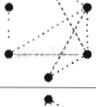
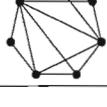
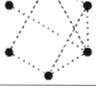
7.4.3			0	105	0	0	9	$\frac{1}{15}$
7.4.4			0	420	0	0	$\frac{137}{15}$	0
7.4.5			0	210	0	0	$\frac{101}{10}$	0
7.4.6			0	35	0	0	$\frac{57}{5}$	0
7.4.7			-60	105	-6300	$\frac{15}{2}$	$\frac{23}{3}$	0
7.5.1			0	105	0	0	$\frac{29}{3}$	$\frac{2}{15}$
7.5.2			0	1260	0	0	$\frac{811}{90}$	$\frac{1}{90}$
7.5.3			0	1260	0	0	$\frac{263}{30}$	0
7.5.4			-20	252	-5040	6	$\frac{113}{12}$	0
7.5.5			0	1260	0	0	$\frac{293}{30}$	$\frac{1}{90}$
7.5.6			0	210	0	0	11	$\frac{1}{15}$
7.5.7			0	1260	0	0	$\frac{1783}{180}$	0
7.5.8			0	630	0	0	$\frac{466}{45}$	0
7.5.9			0	1260	0	0	$\frac{434}{45}$	0

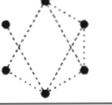
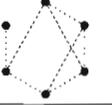
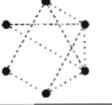
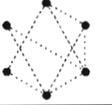
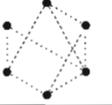
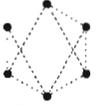
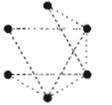
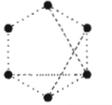
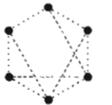
7.5.10			0	1260	0	0	$\frac{107}{10}$	0
7.5.11			0	315	0	0	$\frac{497}{45}$	0
7.5.12			0	1260	0	0	$\frac{57}{5}$	0
7.5.13			0	1260	0	0	$\frac{983}{90}$	0
7.5.14			0	210	0	0	$\frac{79}{6}$	0
7.5.15			0	630	0	0	$\frac{367}{30}$	0
7.5.16			0	1260	0	0	$\frac{2251}{180}$	0
7.5.17			0	315	0	0	$\frac{43}{3}$	0
7.5.18			0	420	0	0	$\frac{64}{5}$	0
7.5.19			0	630	0	0	$\frac{661}{45}$	0
7.5.20			0	210	0	0	$\frac{173}{10}$	0
7.5.21			0	21	0	0	21	0

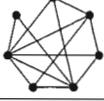
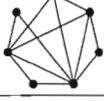
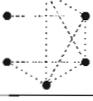
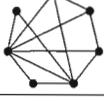
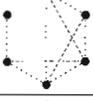
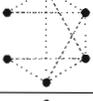
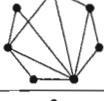
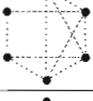
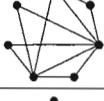
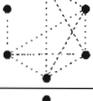
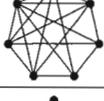
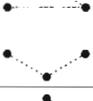
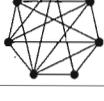
7.5.22			40	630	25200	-30	$\frac{122}{15}$	0
7.5.23			-20	210	-4200	5	$\frac{131}{15}$	0
7.6.1			0	840	0	0	$\frac{307}{30}$	$\frac{1}{60}$
7.6.2			0	630	0	0	$\frac{881}{90}$	$\frac{1}{90}$
7.6.3			0	2520	0	0	$\frac{1709}{180}$	0
7.6.4			0	2520	0	0	$\frac{857}{90}$	0
7.6.5			-5	2520	-12600	15	$\frac{37}{4}$	0
7.6.6			20	420	8400	-10	$\frac{99}{10}$	0
7.6.7			15	2520	37800	-45	$\frac{1831}{180}$	0
7.6.8			0	1260	0	0	$\frac{158}{15}$	0
7.6.9			0	2520	0	0	$\frac{3811}{360}$	$\frac{1}{360}$
7.6.10			0	1260	0	0	$\frac{166}{15}$	$\frac{1}{90}$

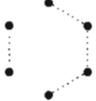
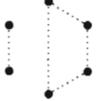
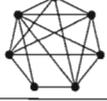
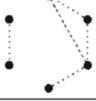
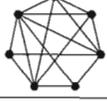
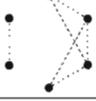
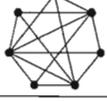
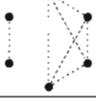
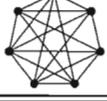
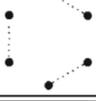
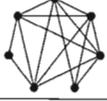
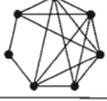
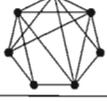
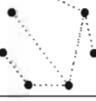
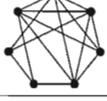
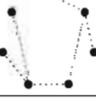
7.6.11			0	2520	0	0	$\frac{185}{18}$	0
7.6.12			-10	1260	-12600	15	$\frac{2023}{180}$	0
7.6.13			0	1260	0	0	$\frac{683}{60}$	0
7.6.14			0	840	0	0	$\frac{149}{12}$	$\frac{1}{60}$
7.6.15			0	1260	0	0	$\frac{119}{10}$	$\frac{1}{90}$
7.6.16			0	630	0	0	$\frac{40}{3}$	$\frac{1}{90}$
7.6.17			0	2520	0	0	$\frac{608}{45}$	0
7.6.18			0	840	0	0	$\frac{643}{60}$	0
7.6.19			0	5040	0	0	$\frac{125}{12}$	0
7.6.20			-10	2520	-25200	30	$\frac{1997}{180}$	0
7.6.21			0	2520	0	0	$\frac{2017}{180}$	0
7.6.22			0	2520	0	0	$\frac{983}{90}$	0

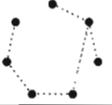
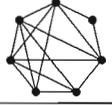
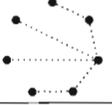
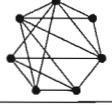
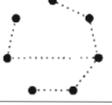
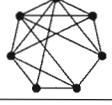
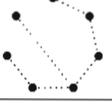
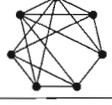
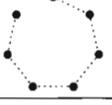
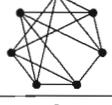
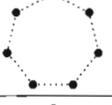
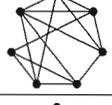
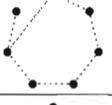
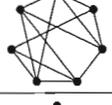
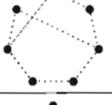
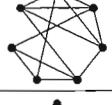
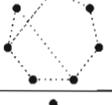
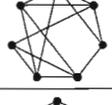
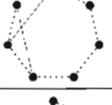
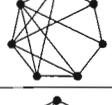
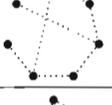
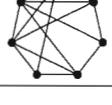
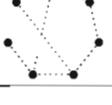
7.6.23			0	1260	0	0	$\frac{469}{45}$	0
7.6.24			5	2520	12600	-15	$\frac{1823}{180}$	0
7.6.25			0	1260	0	0	$\frac{529}{45}$	0
7.6.26			-5	630	-3150	$\frac{15}{4}$	$\frac{199}{18}$	0
7.6.27			0	2520	0	0	$\frac{518}{45}$	0
7.6.28			0	5040	0	0	$\frac{4349}{360}$	0
7.6.29			0	5040	0	0	$\frac{4147}{360}$	0
7.6.30			0	2520	0	0	$\frac{1139}{90}$	0
7.6.31			0	2520	0	0	$\frac{2357}{180}$	0
7.6.32			0	1260	0	0	$\frac{2251}{180}$	0
7.6.33			5	420	2100	$-\frac{5}{2}$	$\frac{283}{20}$	0
7.6.34			0	2520	0	0	$\frac{2141}{180}$	0

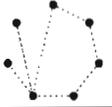
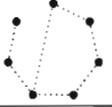
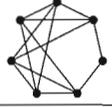
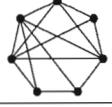
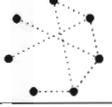
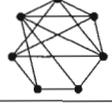
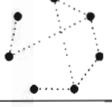
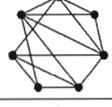
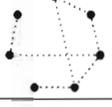
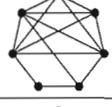
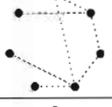
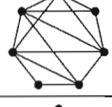
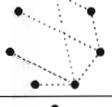
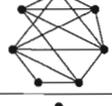
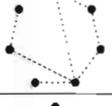
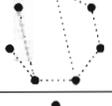
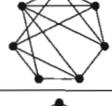
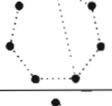
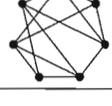
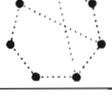
7.6.35			0	1260	0	0	$\frac{769}{60}$	0
7.6.36			0	2520	0	0	$\frac{359}{30}$	0
7.6.37			0	1260	0	0	$\frac{2479}{180}$	0
7.6.38			0	5040	0	0	$\frac{593}{45}$	0
7.6.39			0	1260	0	0	$\frac{1057}{90}$	0
7.6.40			0	5040	0	0	$\frac{4429}{360}$	0
7.6.41			0	1260	0	0	$\frac{1109}{90}$	0
7.6.42			0	2520	0	0	$\frac{343}{30}$	0
7.6.43			5	1260	6300	$-\frac{15}{2}$	$\frac{249}{20}$	0
7.6.44			0	1260	0	0	$\frac{1171}{90}$	0
7.6.45			0	1260	0	0	$\frac{638}{45}$	0
7.6.46			0	2520	0	0	$\frac{206}{15}$	0

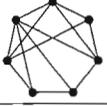
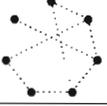
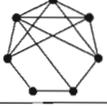
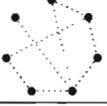
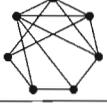
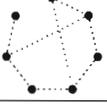
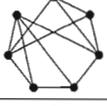
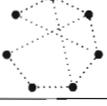
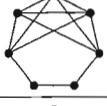
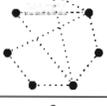
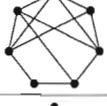
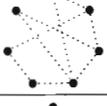
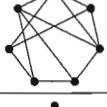
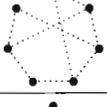
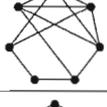
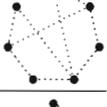
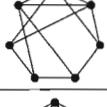
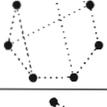
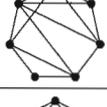
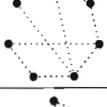
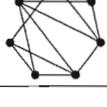
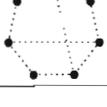
7.6.47			0	2520	0	0	$\frac{619}{45}$	0
7.6.48			0	1260	0	0	$\frac{197}{15}$	0
7.6.49			0	1260	0	0	$\frac{473}{30}$	0
7.6.50			0	5040	0	0	$\frac{5609}{360}$	0
7.6.51			0	2520	0	0	$\frac{917}{60}$	0
7.6.52			0	2520	0	0	$\frac{297}{20}$	0
7.6.53			0	5040	0	0	$\frac{505}{36}$	0
7.6.54			0	5040	0	0	$\frac{1609}{120}$	0
7.6.55			0	840	0	0	$\frac{159}{10}$	0
7.6.56			0	2520	0	0	$\frac{2639}{180}$	0
7.6.57			0	2520	0	0	$\frac{2743}{180}$	0
7.6.58			0	2520	0	0	$\frac{2101}{120}$	0

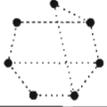
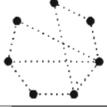
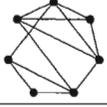
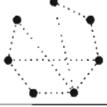
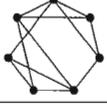
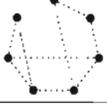
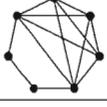
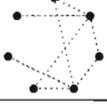
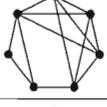
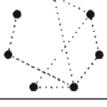
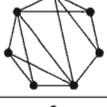
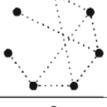
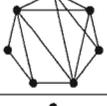
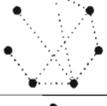
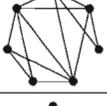
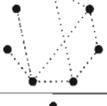
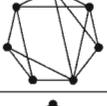
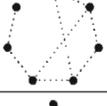
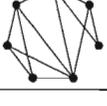
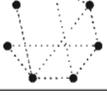
7.6.59			0	2520	0	0	$\frac{961}{60}$	0
7.6.60			0	2520	0	0	$\frac{361}{20}$	0
7.6.61			0	1260	0	0	$\frac{1289}{90}$	0
7.6.62			0	840	0	0	$\frac{401}{30}$	0
7.6.63			0	1260	0	0	$\frac{275}{18}$	0
7.6.64			0	2520	0	0	$\frac{2947}{180}$	0
7.6.65			0	1260	0	0	$\frac{157}{10}$	0
7.6.66			0	630	0	0	$\frac{559}{30}$	0
7.6.67			0	2520	0	0	$\frac{217}{12}$	0
7.6.68			0	840	0	0	$\frac{96}{5}$	0
7.6.69			-20	630	-12600	15	$\frac{43}{5}$	0
7.6.70			-30	420	-12600	15	$\frac{53}{6}$	0

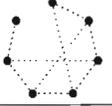
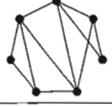
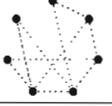
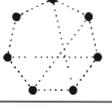
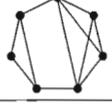
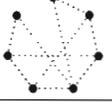
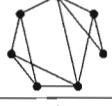
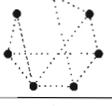
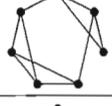
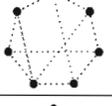
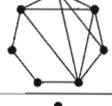
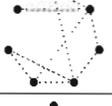
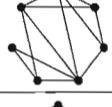
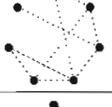
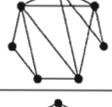
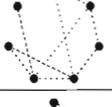
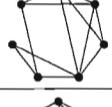
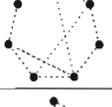
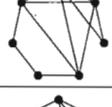
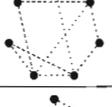
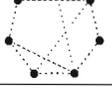
7.6.71			-25	1260	-31500	$\frac{75}{2}$	$\frac{517}{60}$	0
7.6.72			20	315	6300	$-\frac{15}{2}$	$\frac{28}{3}$	0
7.6.73			0	420	0	0	$\frac{46}{5}$	0
7.6.74			20	70	1400	$-\frac{5}{3}$	$\frac{49}{5}$	0
7.6.75			15	1260	18900	$-\frac{45}{2}$	$\frac{142}{15}$	0
7.6.76			-10	630	-6300	$\frac{15}{2}$	$\frac{313}{30}$	0
7.6.77			5	105	525	$-\frac{5}{8}$	$\frac{176}{15}$	0
7.6.78			80	105	8400	-10	8	0
7.7.1			0	420	0	0	$\frac{67}{6}$	$\frac{1}{15}$
7.7.2			0	840	0	0	$\frac{643}{60}$	0
7.7.3			0	2520	0	0	$\frac{103}{10}$	0
7.7.4			0	630	0	0	$\frac{92}{9}$	0

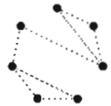
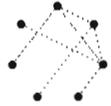
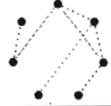
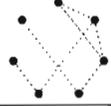
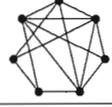
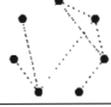
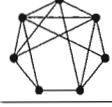
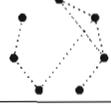
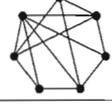
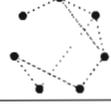
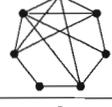
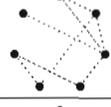
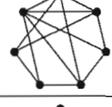
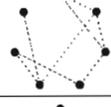
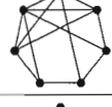
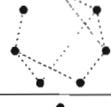
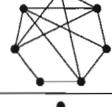
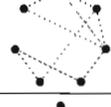
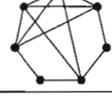
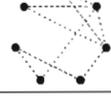
7.7.5			6	2520	15120	-18	$\frac{449}{45}$	0
7.7.6			0	1260	0	0	$\frac{54}{5}$	0
7.7.7			0	840	0	0	$\frac{301}{30}$	0
7.7.8			4	5040	20160	-24	$\frac{1801}{180}$	0
7.7.9			11	2520	27720	-33	$\frac{146}{15}$	0
7.7.10			-22	360	-7920	$\frac{66}{7}$	$\frac{623}{60}$	0
7.7.11			-16	2520	-40320	48	$\frac{959}{90}$	0
7.7.12			16	1260	20160	-24	$\frac{349}{30}$	0
7.7.13			10	1260	12600	-15	$\frac{211}{18}$	0
7.7.14			12	2520	30240	-36	$\frac{521}{45}$	0
7.7.15			-11	2520	-27720	33	$\frac{1967}{180}$	0
7.7.16			-11	2520	-27720	33	$\frac{494}{45}$	0

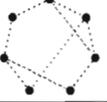
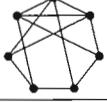
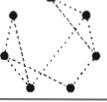
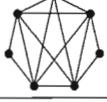
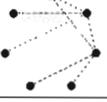
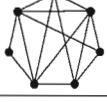
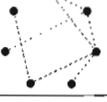
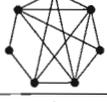
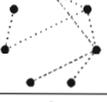
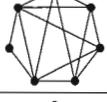
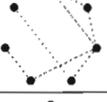
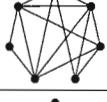
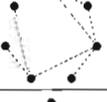
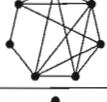
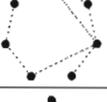
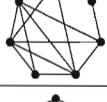
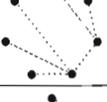
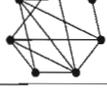
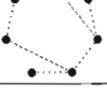
7.7.17			-12	1260	-15120	18	$\frac{229}{20}$	0
7.7.18			-14	2520	-35280	42	$\frac{641}{60}$	0
7.7.19			11	1260	13860	$-\frac{33}{2}$	$\frac{437}{36}$	0
7.7.20			0	2520	0	0	$\frac{2053}{180}$	0
7.7.21			-2	2520	-5040	6	$\frac{497}{45}$	0
7.7.22			0	5040	0	0	$\frac{799}{72}$	0
7.7.23			0	1260	0	0	$\frac{71}{6}$	0
7.7.24			0	2520	0	0	$\frac{217}{18}$	$\frac{1}{90}$
7.7.25			0	2520	0	0	$\frac{349}{30}$	0
7.7.26			0	1260	0	0	$\frac{199}{18}$	0
7.7.27			-4	2520	-10080	12	$\frac{1937}{180}$	0
7.7.28			9	2520	22680	-27	$\frac{471}{40}$	0

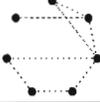
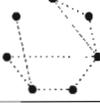
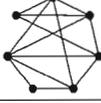
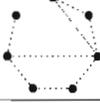
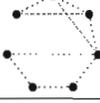
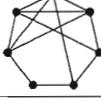
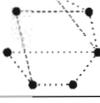
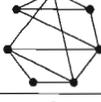
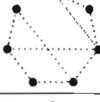
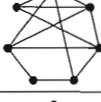
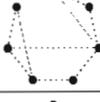
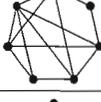
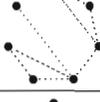
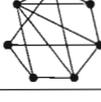
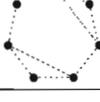
7.7.29			0	630	0	0	$\frac{187}{15}$	0
7.7.30			7	2520	17640	-21	$\frac{109}{9}$	0
7.7.31			8	2520	20160	-24	$\frac{2267}{180}$	0
7.7.32			6	2520	15120	-18	$\frac{542}{45}$	0
7.7.33			-6	1260	-7560	9	$\frac{2431}{180}$	0
7.7.34			-6	420	-2520	3	$\frac{293}{20}$	0
7.7.35			-5	5040	-25200	30	$\frac{2459}{180}$	0
7.7.36			-4	2520	-10080	12	$\frac{596}{45}$	0
7.7.37			-4	630	-2520	3	$\frac{1241}{90}$	0
7.7.38			-2	1260	-2520	3	$\frac{781}{60}$	0
7.7.39			0	2520	0	0	$\frac{233}{18}$	0
7.7.40			0	5040	0	0	$\frac{4393}{360}$	0

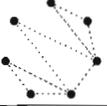
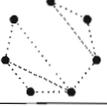
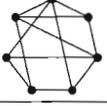
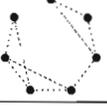
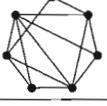
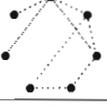
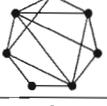
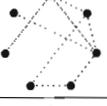
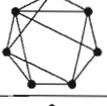
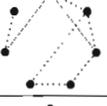
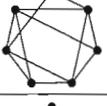
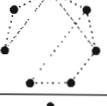
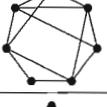
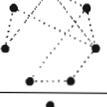
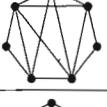
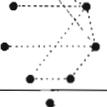
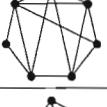
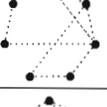
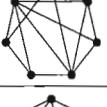
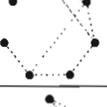
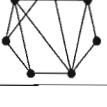
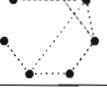
7.7.41			0	1260	0	0	$\frac{1327}{90}$	0
7.7.42			0	840	0	0	$\frac{267}{20}$	0
7.7.43			0	5040	0	0	$\frac{335}{24}$	0
7.7.44			0	2520	0	0	$\frac{72}{5}$	0
7.7.45			0	2520	0	0	$\frac{1187}{90}$	0
7.7.46			0	420	0	0	$\frac{83}{6}$	0
7.7.47			0	840	0	0	$\frac{779}{60}$	0
7.7.48			0	1260	0	0	$\frac{64}{5}$	0
7.7.49			0	2520	0	0	$\frac{608}{45}$	$\frac{1}{90}$
7.7.50			0	630	0	0	$\frac{41}{3}$	$\frac{1}{15}$
7.7.51			0	1260	0	0	$\frac{1117}{90}$	0
7.7.52			0	2520	0	0	$\frac{917}{60}$	$\frac{1}{60}$

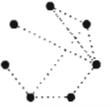
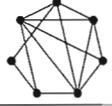
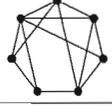
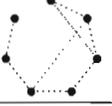
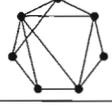
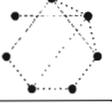
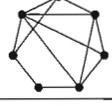
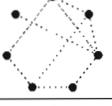
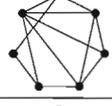
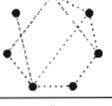
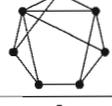
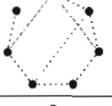
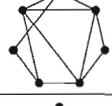
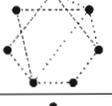
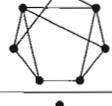
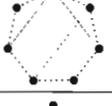
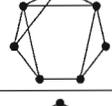
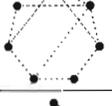
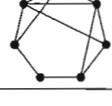
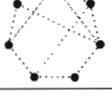
7.7.53			0	1260	0	0	$\frac{427}{30}$	0
7.7.54			0	2520	0	0	$\frac{2101}{120}$	$\frac{1}{90}$
7.7.55			4	630	2520	-3	$\frac{691}{45}$	0
7.7.56			0	1260	0	0	$\frac{169}{10}$	0
7.7.57			0	2520	0	0	$\frac{737}{45}$	0
7.7.58			0	1260	0	0	$\frac{3319}{180}$	0
7.7.59			0	2520	0	0	$\frac{1361}{90}$	0
7.7.60			0	5040	0	0	$\frac{2629}{180}$	0
7.7.61			0	2520	0	0	$\frac{559}{36}$	$\frac{1}{90}$
7.7.62			0	2520	0	0	$\frac{72}{5}$	0
7.7.63			0	1260	0	0	$\frac{313}{18}$	0
7.7.64			0	2520	0	0	$\frac{2957}{180}$	0

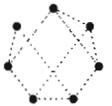
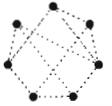
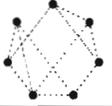
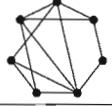
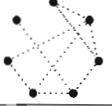
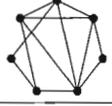
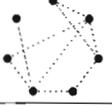
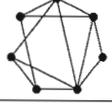
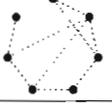
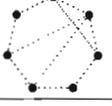
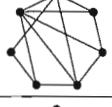
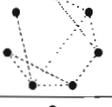
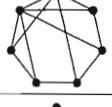
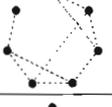
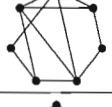
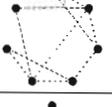
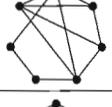
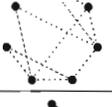
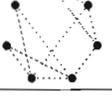
7.7.65			13	630	8190	$-\frac{39}{4}$	$\frac{517}{45}$	0
7.7.66			0	1260	0	0	$\frac{2177}{180}$	0
7.7.67			0	2520	0	0	$\frac{2021}{180}$	0
7.7.68			-3	2520	-7560	9	$\frac{1967}{180}$	0
7.7.69			0	2520	0	0	$\frac{403}{36}$	0
7.7.70			-5	5040	-25200	30	$\frac{109}{10}$	0
7.7.71			8	2520	20160	-24	$\frac{2143}{180}$	0
7.7.72			8	5040	40320	-48	$\frac{249}{20}$	0
7.7.73			7	5040	35280	-42	$\frac{119}{10}$	0
7.7.74			7	2520	17640	-21	$\frac{237}{20}$	0
7.7.75			-6	5040	-30240	36	$\frac{4877}{360}$	0
7.7.76			-6	1260	-7560	9	$\frac{847}{60}$	0

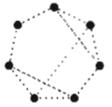
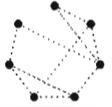
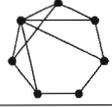
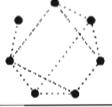
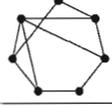
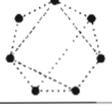
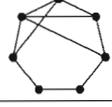
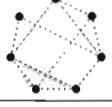
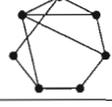
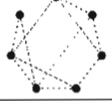
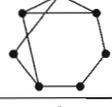
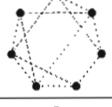
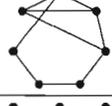
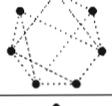
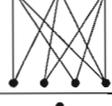
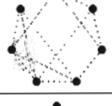
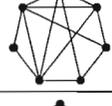
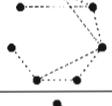
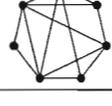
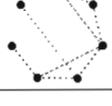
7.7.77			-5	5040	-25200	30	$\frac{4693}{360}$	0
7.7.78			-5	2520	-12600	15	$\frac{269}{20}$	0
7.7.79			-8	840	-6720	8	$\frac{773}{60}$	0
7.7.80			-4	2520	-10080	12	$\frac{577}{45}$	0
7.7.81			0	630	0	0	$\frac{115}{9}$	$\frac{1}{90}$
7.7.82			0	5040	0	0	$\frac{2119}{180}$	0
7.7.83			0	2520	0	0	$\frac{703}{60}$	0
7.7.84			0	1260	0	0	$\frac{517}{45}$	0
7.7.85			0	1260	0	0	$\frac{1067}{90}$	0
7.7.86			-4	2520	-10080	12	$\frac{2053}{180}$	0
7.7.87			0	420	0	0	$\frac{59}{5}$	0
7.7.88			-4	2520	-10080	12	$\frac{164}{15}$	0

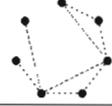
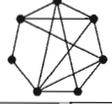
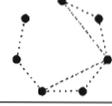
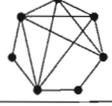
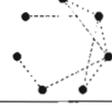
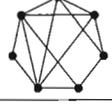
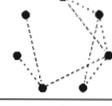
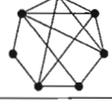
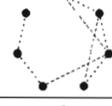
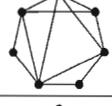
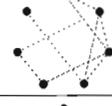
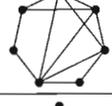
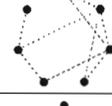
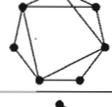
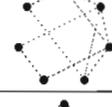
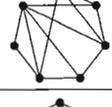
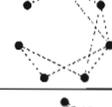
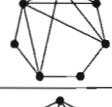
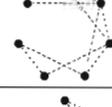
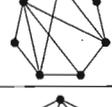
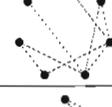
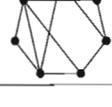
7.7.89			-6	1260	-7560	9	$\frac{977}{90}$	0
7.7.90			-12	2520	-30240	36	$\frac{191}{18}$	0
7.7.91			4	1260	5040	-6	$\frac{526}{45}$	0
7.7.92			0	2520	0	0	$\frac{2269}{180}$	0
7.7.93			2	1260	2520	-3	$\frac{1127}{90}$	0
7.7.94			0	2520	0	0	$\frac{1147}{90}$	0
7.7.95			0	1260	0	0	$\frac{247}{18}$	0
7.7.96			-4	2520	-10080	12	$\frac{2447}{180}$	0
7.7.97			0	630	0	0	$\frac{646}{45}$	0
7.7.98			-2	2520	-5040	6	$\frac{1231}{90}$	0
7.7.99			4	1260	5040	-6	$\frac{562}{45}$	0
7.7.100			5	2520	12600	-15	$\frac{2129}{180}$	0

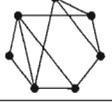
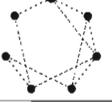
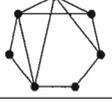
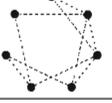
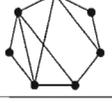
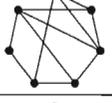
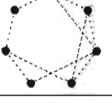
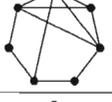
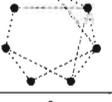
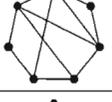
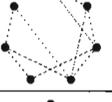
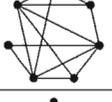
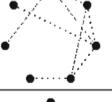
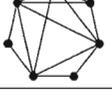
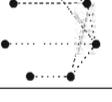
7.7.101			-3	630	-1890	$\frac{9}{4}$	$\frac{637}{45}$	0
7.7.102			-4	1260	-5040	6	$\frac{203}{15}$	0
7.7.103			-5	1260	-6300	$\frac{15}{2}$	$\frac{578}{45}$	0
7.7.104			0	1260	0	0	$\frac{116}{9}$	0
7.7.105			0	5040	0	0	$\frac{4669}{360}$	0
7.7.106			1	2520	2520	-3	$\frac{541}{45}$	0
7.7.107			-1	1260	-1260	$\frac{3}{2}$	$\frac{611}{45}$	0
7.7.108			0	2520	0	0	$\frac{623}{45}$	0
7.7.109			0	2520	0	0	$\frac{2477}{180}$	$\frac{1}{360}$
7.7.110			0	5040	0	0	$\frac{4553}{360}$	0
7.7.111			0	5040	0	0	$\frac{4439}{360}$	0
7.7.112			0	5040	0	0	$\frac{941}{72}$	0

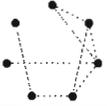
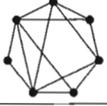
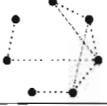
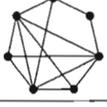
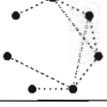
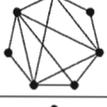
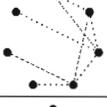
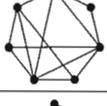
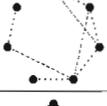
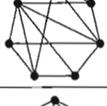
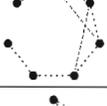
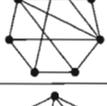
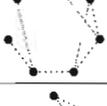
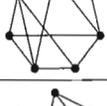
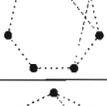
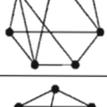
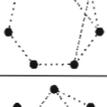
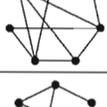
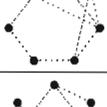
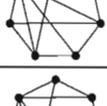
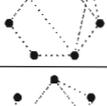
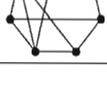
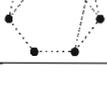
7.7.113			0	5040	0	0	$\frac{129}{10}$	0
7.7.114			0	2520	0	0	$\frac{1487}{120}$	0
7.7.115			0	2520	0	0	$\frac{1169}{90}$	0
7.7.116			2	5040	10080	-12	$\frac{4331}{360}$	0
7.7.117			0	2520	0	0	$\frac{1289}{90}$	0
7.7.118			0	5040	0	0	$\frac{5081}{360}$	0
7.7.119			0	2520	0	0	$\frac{853}{60}$	0
7.7.120			1	5040	5040	-6	$\frac{487}{36}$	0
7.7.121			0	2520	0	0	$\frac{1451}{90}$	0
7.7.122			-1	5040	-5040	6	$\frac{1093}{72}$	0
7.7.123			0	5040	0	0	$\frac{1903}{120}$	0
7.7.124			-1	2520	-2520	3	$\frac{1847}{120}$	0

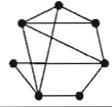
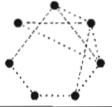
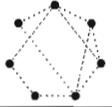
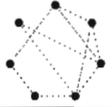
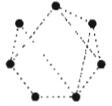
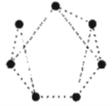
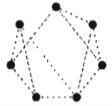
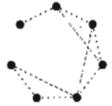
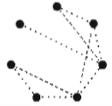
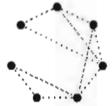
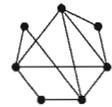
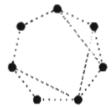
7.7.125			-2	2520	-5040	6	$\frac{2651}{180}$	0
7.7.126			4	1260	5040	-6	$\frac{3059}{180}$	0
7.7.127			2	2520	5040	-6	$\frac{1513}{90}$	0
7.7.128			0	2520	0	0	$\frac{419}{30}$	0
7.7.129			0	5040	0	0	$\frac{591}{40}$	0
7.7.130			0	5040	0	0	$\frac{839}{60}$	0
7.7.131			0	1260	0	0	$\frac{137}{9}$	0
7.7.132			0	5040	0	0	$\frac{253}{18}$	0
7.7.133			0	2520	0	0	$\frac{799}{60}$	0
7.7.134			0	2520	0	0	$\frac{1901}{120}$	0
7.7.135			0	2520	0	0	$\frac{1477}{90}$	0
7.7.136			0	1260	0	0	$\frac{191}{12}$	0

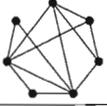
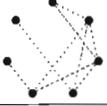
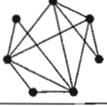
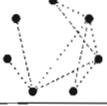
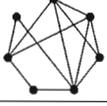
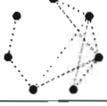
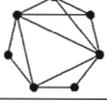
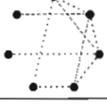
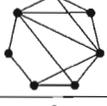
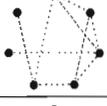
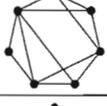
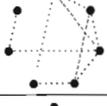
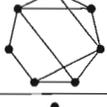
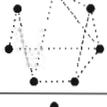
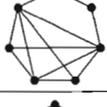
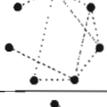
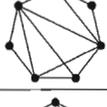
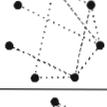
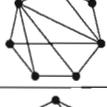
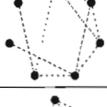
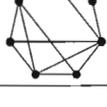
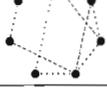
7.7.137			1	1260	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{287}{20}$	0
7.7.138			-1	5040	-5040	6	$\frac{917}{60}$	0
7.7.139			0	5040	0	0	$\frac{1091}{72}$	0
7.7.140			-4	2520	-10080	12	$\frac{949}{60}$	0
7.7.141			3	1260	3780	$-\frac{9}{2}$	$\frac{319}{18}$	0
7.7.142			3	2520	7560	-9	$\frac{823}{45}$	0
7.7.143			3	2520	7560	-9	$\frac{1603}{90}$	0
7.7.144			-2	5040	-10080	12	$\frac{7463}{360}$	0
7.7.145			-2	1260	-2520	3	$\frac{785}{36}$	0
7.7.146			-2	840	-1680	2	$\frac{304}{15}$	0
7.7.147			0	2520	0	0	$\frac{1147}{90}$	0
7.7.148			0	1260	0	0	$\frac{767}{60}$	0

7.7.149			0	1260	0	0	$\frac{202}{15}$	0
7.7.150			3	2520	7560	-9	$\frac{2233}{180}$	0
7.7.151			0	2520	0	0	$\frac{803}{60}$	0
7.7.152			0	1260	0	0	$\frac{129}{10}$	0
7.7.153			4	2520	10080	-12	$\frac{249}{20}$	0
7.7.154			0	2520	0	0	$\frac{664}{45}$	0
7.7.155			0	2520	0	0	$\frac{2657}{180}$	0
7.7.156			0	1260	0	0	$\frac{587}{36}$	0
7.7.157			0	5040	0	0	$\frac{5069}{360}$	0
7.7.158			0	5040	0	0	$\frac{587}{40}$	0
7.7.159			0	5040	0	0	$\frac{539}{36}$	0
7.7.160			0	5040	0	0	$\frac{85}{6}$	0

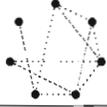
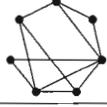
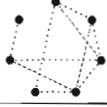
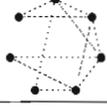
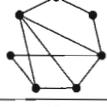
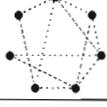
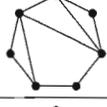
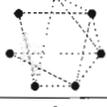
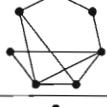
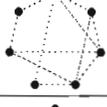
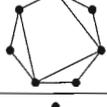
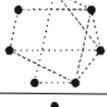
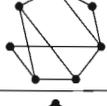
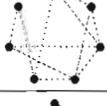
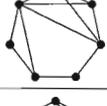
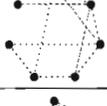
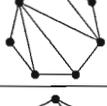
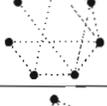
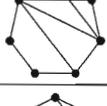
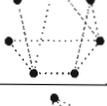
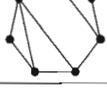
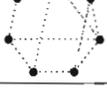
7.7.161			0	5040	0	0	$\frac{5039}{360}$	0
7.7.162			0	5040	0	0	$\frac{5719}{360}$	0
7.7.163			0	5040	0	0	$\frac{5963}{360}$	0
7.7.164			0	2520	0	0	$\frac{101}{6}$	0
7.7.165			0	2520	0	0	$\frac{463}{30}$	0
7.7.166			0	5040	0	0	$\frac{1933}{120}$	0
7.7.167			0	2520	0	0	$\frac{3013}{180}$	0
7.7.168			2	5040	10080	-12	$\frac{1361}{90}$	0
7.7.169			0	2520	0	0	$\frac{159}{10}$	0
7.7.170			0	5040	0	0	$\frac{1151}{72}$	0
7.7.171			0	2520	0	0	$\frac{2377}{180}$	0
7.7.172			0	2520	0	0	$\frac{69}{5}$	0

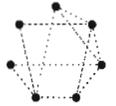
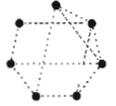
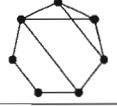
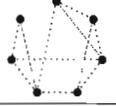
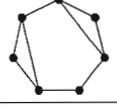
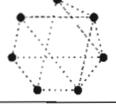
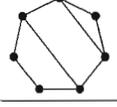
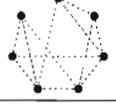
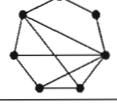
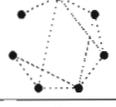
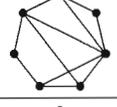
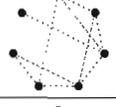
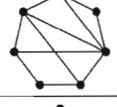
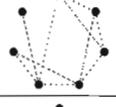
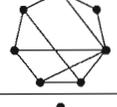
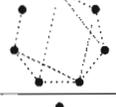
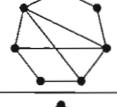
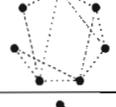
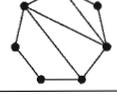
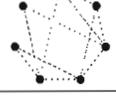
7.7.173			0	5040	0	0	$\frac{4613}{360}$	0
7.7.174			0	5040	0	0	$\frac{4633}{360}$	0
7.7.175			0	1260	0	0	$\frac{1183}{90}$	0
7.7.176			0	2520	0	0	$\frac{1259}{90}$	0
7.7.177			0	2520	0	0	$\frac{116}{9}$	0
7.7.178			1	2520	2520	-3	$\frac{1103}{90}$	0
7.7.179			0	1260	0	0	$\frac{1099}{90}$	0
7.7.180			5	2520	12600	-15	$\frac{143}{12}$	0
7.7.181			-6	1260	-7560	9	$\frac{194}{15}$	0
7.7.182			-4	2520	-10080	12	$\frac{626}{45}$	0
7.7.183			-4	2520	-10080	12	$\frac{2503}{180}$	0
7.7.184			-2	2520	-5040	6	$\frac{1193}{90}$	0

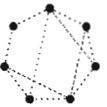
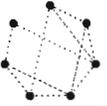
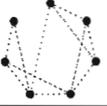
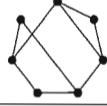
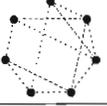
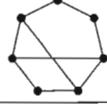
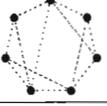
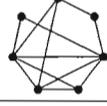
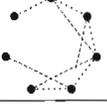
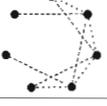
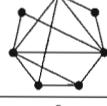
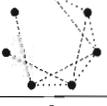
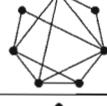
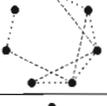
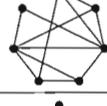
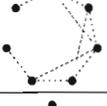
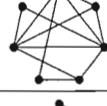
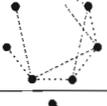
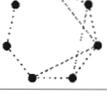
7.7.185			3	1260	3780	$-\frac{9}{2}$	$\frac{2861}{180}$	0
7.7.186			3	1260	3780	$-\frac{9}{2}$	$\frac{2897}{180}$	0
7.7.187			3	5040	15120	-18	$\frac{1883}{120}$	0
7.7.188			0	1260	0	0	$\frac{151}{10}$	0
7.7.189			-1	1260	-1260	$\frac{3}{2}$	$\frac{2561}{180}$	0
7.7.190			3	630	1890	$-\frac{9}{4}$	$\frac{1477}{90}$	0
7.7.191			-1	1260	-1260	$\frac{3}{2}$	$\frac{83}{6}$	0
7.7.192			0	2520	0	0	$\frac{1321}{90}$	0
7.7.193			0	2520	0	0	$\frac{499}{36}$	0
7.7.194			1	2520	2520	-3	$\frac{947}{60}$	0
7.7.195			0	630	0	0	$\frac{509}{30}$	0
7.7.196			1	2520	2520	-3	$\frac{2683}{180}$	0

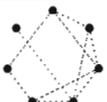
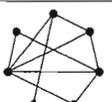
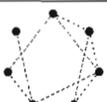
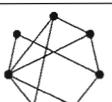
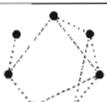
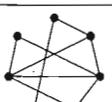
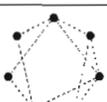
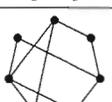
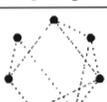
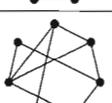
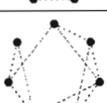
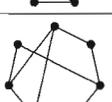
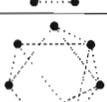
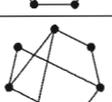
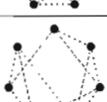
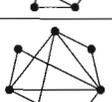
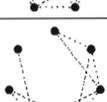
7.7.197			0	630	0	0	$\frac{674}{45}$	0
7.7.198			0	1260	0	0	$\frac{1367}{90}$	0
7.7.199			0	630	0	0	$\frac{293}{18}$	0
7.7.200			0	1260	0	0	$\frac{661}{45}$	0
7.7.201			0	1260	0	0	$\frac{307}{20}$	0
7.7.202			0	2520	0	0	$\frac{439}{30}$	0
7.7.203			0	2520	0	0	$\frac{143}{10}$	0
7.7.204			4	2520	10080	-12	$\frac{2771}{180}$	0
7.7.205			0	1260	0	0	$\frac{275}{18}$	0
7.7.206			0	5040	0	0	$\frac{5609}{360}$	0
7.7.207			0	2520	0	0	$\frac{297}{20}$	0
7.7.208			0	2520	0	0	$\frac{1289}{90}$	0

7.7.209			0	2520	0	0	$\frac{2833}{180}$	0
7.7.210			0	630	0	0	$\frac{149}{10}$	0
7.7.211			-2	1260	-2520	3	$\frac{614}{45}$	0
7.7.212			2	630	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1403}{90}$	0
7.7.213			0	2520	0	0	$\frac{217}{12}$	0
7.7.214			0	1260	0	0	$\frac{50}{3}$	0
7.7.215			0	1260	0	0	$\frac{151}{9}$	0
7.7.216			0	2520	0	0	$\frac{863}{45}$	0
7.7.217			0	1260	0	0	$\frac{179}{9}$	0
7.7.218			-2	1260	-2520	3	$\frac{179}{10}$	0
7.7.219			0	5040	0	0	$\frac{3137}{180}$	0
7.7.220			0	5040	0	0	$\frac{3161}{180}$	0

7.7.221			0	5040	0	0	$\frac{667}{40}$	0
7.7.222			0	5040	0	0	$\frac{5963}{360}$	0
7.7.223			0	2520	0	0	$\frac{3559}{180}$	0
7.7.224			0	5040	0	0	$\frac{1123}{60}$	0
7.7.225			0	5040	0	0	$\frac{877}{45}$	0
7.7.226			0	5040	0	0	$\frac{6793}{360}$	0
7.7.227			0	2520	0	0	$\frac{3469}{180}$	0
7.7.228			0	5040	0	0	$\frac{811}{45}$	0
7.7.229			0	2520	0	0	$\frac{169}{10}$	0
7.7.230			0	5040	0	0	$\frac{2101}{120}$	0
7.7.231			0	2520	0	0	$\frac{517}{30}$	0
7.7.232			0	2520	0	0	$\frac{737}{45}$	0

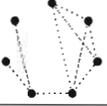
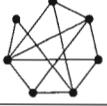
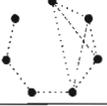
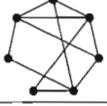
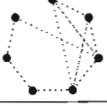
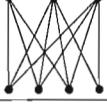
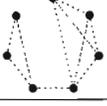
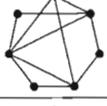
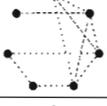
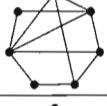
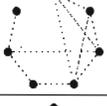
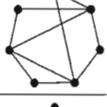
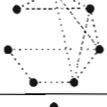
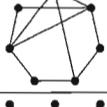
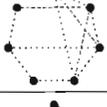
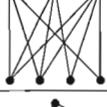
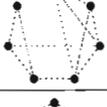
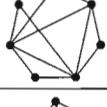
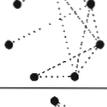
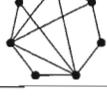
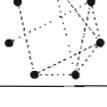
7.7.233			0	1260	0	0	$\frac{1181}{60}$	0
7.7.234			0	2520	0	0	$\frac{3319}{180}$	0
7.7.235			0	5040	0	0	$\frac{877}{45}$	0
7.7.236			0	2520	0	0	$\frac{1667}{90}$	0
7.7.237			0	2520	0	0	$\frac{2683}{120}$	0
7.7.238			0	2520	0	0	$\frac{1987}{90}$	0
7.7.239			0	2520	0	0	$\frac{497}{30}$	0
7.7.240			0	5040	0	0	$\frac{667}{40}$	0
7.7.241			0	2520	0	0	$\frac{253}{15}$	0
7.7.242			0	2520	0	0	$\frac{2833}{180}$	0
7.7.243			0	1260	0	0	$\frac{113}{6}$	0
7.7.244			0	5040	0	0	$\frac{296}{15}$	0

7.7.245			1	2520	2520	-3	$\frac{3217}{180}$	0
7.7.246			0	5040	0	0	$\frac{811}{45}$	0
7.7.247			0	2520	0	0	$\frac{1627}{90}$	0
7.7.248			0	1260	0	0	$\frac{3857}{180}$	0
7.7.249			-1	1260	-1260	$\frac{3}{2}$	$\frac{3713}{180}$	0
7.7.250			0	5040	0	0	$\frac{1075}{72}$	0
7.7.251			0	2520	0	0	$\frac{317}{20}$	0
7.7.252			0	5040	0	0	$\frac{1351}{90}$	0
7.7.253			0	5040	0	0	$\frac{2627}{180}$	0
7.7.254			0	2520	0	0	$\frac{644}{45}$	0
7.7.255			0	2520	0	0	$\frac{2717}{180}$	0
7.7.256			-1	5040	-5040	6	$\frac{5011}{360}$	0

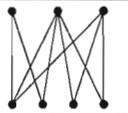
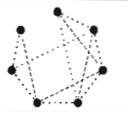
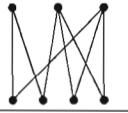
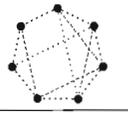
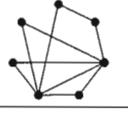
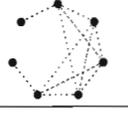
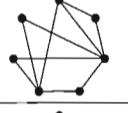
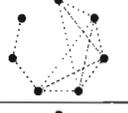
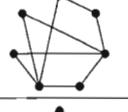
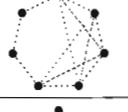
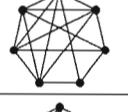
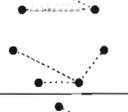
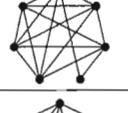
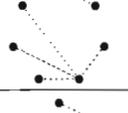
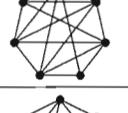
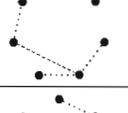
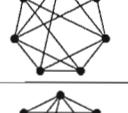
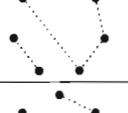
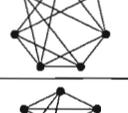
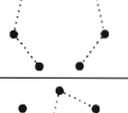
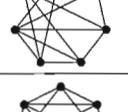
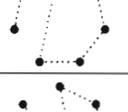
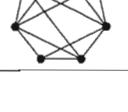
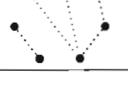
7.7.257			3	2520	7560	-9	$\frac{901}{60}$	0
7.7.258			0	2520	0	0	$\frac{1013}{60}$	0
7.7.259			0	2520	0	0	$\frac{1093}{60}$	0
7.7.260			0	5040	0	0	$\frac{1171}{72}$	0
7.7.261			0	5040	0	0	$\frac{1481}{90}$	0
7.7.262			-1	2520	-2520	3	$\frac{233}{15}$	0
7.7.263			0	1260	0	0	$\frac{1151}{60}$	0
7.7.264			1	5040	5040	-6	$\frac{421}{24}$	0
7.7.265			1	5040	5040	-6	$\frac{1577}{90}$	0
7.7.266			-2	840	-1680	2	$\frac{403}{20}$	0
7.7.267			-1	2520	-2520	3	$\frac{7223}{360}$	0
7.7.268			0	5040	0	0	$\frac{3071}{180}$	0

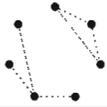
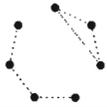
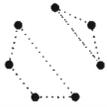
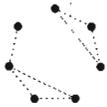
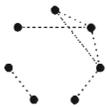
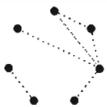
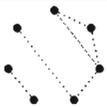
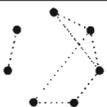
7.7.269			0	5040	0	0	$\frac{1937}{120}$	0
7.7.270			-1	2520	-2520	3	$\frac{259}{15}$	0
7.7.271			0	5040	0	0	$\frac{829}{45}$	0
7.7.272			0	2520	0	0	$\frac{3289}{180}$	0
7.7.273			0	5040	0	0	$\frac{877}{45}$	0
7.7.274			0	5040	0	0	$\frac{296}{15}$	0
7.7.275			0	2520	0	0	$\frac{2683}{120}$	0
7.7.276			0	2520	0	0	$\frac{667}{30}$	0
7.7.277			0	5040	0	0	$\frac{1024}{45}$	0
7.7.278			0	5040	0	0	$\frac{1987}{90}$	0
7.7.279			0	2520	0	0	$\frac{4649}{180}$	0
7.7.280			0	2520	0	0	$\frac{1607}{60}$	0

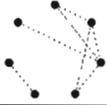
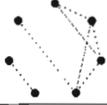
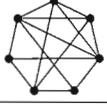
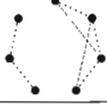
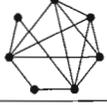
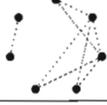
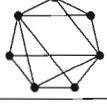
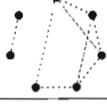
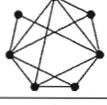
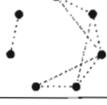
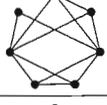
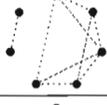
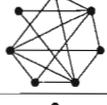
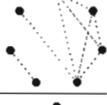
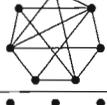
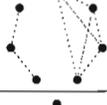
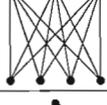
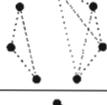
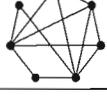
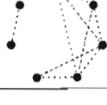
7.7.281			1	360	360	$-\frac{3}{7}$	$\frac{5887}{180}$	0
7.7.282			0	1260	0	0	$\frac{177}{10}$	0
7.7.283			0	2520	0	0	$\frac{361}{20}$	0
7.7.284			0	2520	0	0	$\frac{199}{12}$	0
7.7.285			-2	1260	-2520	3	$\frac{1111}{60}$	0
7.7.286			0	2520	0	0	$\frac{571}{30}$	0
7.7.287			0	5040	0	0	$\frac{241}{12}$	0
7.7.288			0	2520	0	0	$\frac{571}{30}$	0
7.7.289			0	1260	0	0	$\frac{337}{15}$	0
7.7.290			0	5040	0	0	$\frac{861}{40}$	0
7.7.291			1	1260	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1477}{60}$	0
7.7.292			0	840	0	0	$\frac{479}{30}$	0

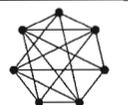
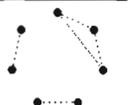
7.7.293			0	2520	0	0	$\frac{134}{9}$	0
7.7.294			0	420	0	0	$\frac{143}{10}$	0
7.7.295			-4	840	-3360	4	$\frac{277}{20}$	0
7.7.296			4	1260	5040	-6	$\frac{703}{45}$	0
7.7.297			4	420	1680	-2	$\frac{224}{15}$	0
7.7.298			0	2520	0	0	$\frac{1523}{90}$	0
7.7.299			0	2520	0	0	$\frac{244}{15}$	0
7.7.300			0	1260	0	0	$\frac{287}{15}$	0
7.7.301			0	2520	0	0	$\frac{826}{45}$	0
7.7.302			0	1260	0	0	$\frac{784}{45}$	0
7.7.303			0	1260	0	0	$\frac{818}{45}$	0
7.7.304			0	2520	0	0	$\frac{1043}{60}$	0

7.7.305			0	2520	0	0	$\frac{3049}{180}$	0
7.7.306			-2	2520	-5040	6	$\frac{1633}{90}$	0
7.7.307			0	630	0	0	$\frac{89}{5}$	0
7.7.308			1	1260	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1459}{90}$	0
7.7.309			-1	630	-630	$\frac{3}{4}$	$\frac{832}{45}$	0
7.7.310			0	1260	0	0	$\frac{884}{45}$	0
7.7.311			1	630	630	$-\frac{3}{4}$	$\frac{1879}{90}$	0
7.7.312			0	2520	0	0	$\frac{179}{9}$	0
7.7.313			0	2520	0	0	$\frac{102}{5}$	0
7.7.314			0	2520	0	0	$\frac{863}{45}$	0
7.7.315			0	1260	0	0	$\frac{2081}{90}$	0
7.7.316			0	2520	0	0	$\frac{3857}{180}$	0

7.7.317			0	2520	0	0	$\frac{976}{45}$	0
7.7.318			1	1260	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1136}{45}$	0
7.7.319			0	420	0	0	$\frac{211}{10}$	0
7.7.320			0	840	0	0	$\frac{593}{30}$	0
7.7.321			1	420	420	$-\frac{1}{2}$	$\frac{263}{12}$	0
7.7.322			12	420	5040	-6	$\frac{93}{10}$	0
7.7.323			24	105	2520	-3	10	0
7.7.324			18	1260	22680	-27	$\frac{841}{90}$	0
7.7.325			14	1260	17640	-21	$\frac{91}{10}$	0
7.7.326			6	1260	7560	-9	$\frac{109}{12}$	0
7.7.327			5	252	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{39}{4}$	0
7.7.328			-14	1260	-17640	21	$\frac{101}{10}$	0

7.7.329			-4	315	-1260	$\frac{3}{2}$	$\frac{49}{5}$	0
7.7.330			12	210	2520	-3	$\frac{34}{3}$	0
7.7.331			6	140	840	-1	$\frac{99}{10}$	0
7.7.332			13	420	5460	$-\frac{13}{2}$	$\frac{581}{60}$	0
7.7.333			-12	105	-1260	$\frac{3}{2}$	$\frac{52}{5}$	0
7.7.334			-19	420	-7980	$\frac{19}{2}$	$\frac{158}{15}$	0
7.7.335			18	210	3780	$-\frac{9}{2}$	$\frac{23}{2}$	0
7.7.336			-11	1260	-13860	$\frac{33}{2}$	$\frac{1843}{180}$	0
7.7.337			-12	630	-7560	9	$\frac{481}{45}$	0
7.7.338			-7	1260	-8820	$\frac{21}{2}$	$\frac{449}{45}$	0
7.7.339			2	1260	2520	-3	$\frac{149}{15}$	0
7.7.340			8	1260	10080	-12	$\frac{331}{30}$	0

7.7.341			4	315	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{512}{45}$	0
7.7.342			8	1260	10080	-12	$\frac{176}{15}$	0
7.7.343			7	1260	8820	$-\frac{21}{2}$	$\frac{1013}{90}$	0
7.7.344			-4	630	-2520	3	$\frac{109}{10}$	0
7.7.345			-6	210	-1260	$\frac{3}{2}$	$\frac{27}{2}$	0
7.7.346			-6	630	-3780	$\frac{9}{2}$	$\frac{377}{30}$	0
7.7.347			-5	1260	-6300	$\frac{15}{2}$	$\frac{2311}{180}$	0
7.7.348			4	315	1260	$-\frac{3}{2}$	$\frac{44}{3}$	0
7.7.349			-4	420	-1680	2	$\frac{197}{15}$	0
7.7.350			6	105	630	$-\frac{3}{4}$	$\frac{61}{5}$	0
7.7.351			-17	35	-595	$\frac{17}{24}$	$\frac{64}{5}$	0
7.7.352			3	630	1890	$-\frac{9}{4}$	$\frac{676}{45}$	0

7.7.353			-2	210	-420	$\frac{1}{2}$	$\frac{529}{30}$	0
7.7.354			.1	21	21	$-\frac{1}{40}$	$\frac{64}{3}$	0
7.7.355			-50	315	-15750	$\frac{75}{4}$	$\frac{127}{15}$	0
7.7.356			20	105	2100	$-\frac{5}{2}$	$\frac{136}{15}$	0

APPENDICE B

PROCÉDURES MAPLE UTILISÉES

Nous présentons dans cet appendice des programmes en Maple (Maplesoft, 2008) que nous avons créés pour illustrer les résultats relatifs à la présente thèse. Ces procédures implémentent la méthode d'Ehrhart, la méthode de Monte-Carlo pour le calcul des poids de Mayer et de Ree-Hoover ainsi que des procédures pour le calcul du start content et pour l'analyse de certains paramètres liés aux graphes. Finalement nous présentons des petits programmes en Maple qui implémentent la méthode de Fourier pour le calcul du poids de Mayer.

B.1 Polynôme d'Ehrhart

```
with(codegen) :  
with(GraphTheory) :  
with(CurveFitting) :  
with(SpecialGraphs) :
```

Cette procédure construit la fonction $volume_g(n)$ pour calculer le nombre de points à coordonnées entières contenus dans les dilatés du graphe g donné en paramètre.

```
make := proc(g) local procbody, locals, mainseq, i;  
    procbody := Name(nam..integer);
```

```

procbody := procbody, Parameters(n..integer);
procbody := procbody, Options(autocompile);
procbody := procbody, Description();
locals := seq(v||i..integer, i=1..nops(Vertices(g))-1);
locals := locals, S..integer;
locals := locals, seq(r||i..integer, i=1..nops(Vertices(g))-1);
procbody := procbody, Locals(locals);
procbody := procbody, Globals();

mainseq := Assign(S, 0);
for i from 1 to (nops(Vertices(g))-1) do
  mainseq := mainseq, Assign(r||i,
    nops(ShortestPath(g, x0, x||i)) * n);
od:
mainseq := mainseq, makefor(g, 1);
mainseq := mainseq, Return(S);
procbody := procbody, StatSeq(mainseq);
return Proc(procbody);
end proc:

```

Cette procédure construit récursivement les boucles correspondant aux différentes contraintes imposés par le graphe.

```

makefor := proc(g, niveau) local forbody, conditions, i, operation;
  forbody := v||niveau, -r||niveau, 1, r||niveau, true;
  conditions := true;
  for i from 0 to niveau - 1 do
    if member(x||i, convert(Neighbors(g, x||niveau), set)) then

```

```

        conditions := conditions and abs(v||niveau - v||i) <= n;
    fi:
od:
conditions := subs(v0=0, conditions);
if niveau >= nops(Vertices(g))-1
    then operation := Assign(S, S + 1);
    else operation := makefor(g, niveau+1);
fi:
forbody := forbody, StatSeq(If(conditions, StatSeq(operation)));
For(forbody);
end proc:

```

Cette procédure renomme les sommets de manière appropriée pour *make()* et retourne la fonction $volume_g(n)$ construite.

```

graphToProc := proc(g)
    RelabelVertices(g, [seq(x||i, i=0..NumberOfVertices(g)-1)]);
    intrep2maple(make(%));
end proc:

```

Cette procédure calcule le nombre de points à l'intérieur des dilatés du graphe g et calcule le polynôme d'Ehrhart.

```

ehrhart := proc(g) local volume, v, i;
    option remember;
    volume := graphToProc(g):
    v := [0$nops(Vertices(g))]:
    for i from 1 to nops(Vertices(g)) do

```

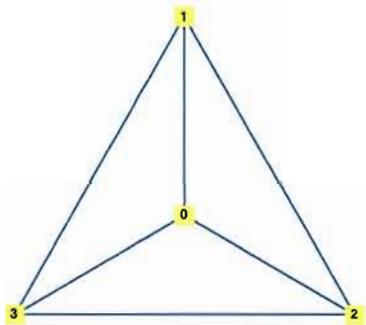
188

```
    v[i] := [i, volume(i)];  
od:  
PolynomialInterpolation(v, n);  
end proc;
```

B.1.1 Exemple d'utilisation

Soit g le graphe complet à 4 sommets.

```
g := RelabelVertices(CompleteGraph(4), [seq(i, i=0..3)]);  
DrawGraph(g);
```



Dans ce cas, le programme $volume_g(n)$ généré par $graphToProc(g)$ est :

```
proc (n::integer)  
    local S, r1, r2, r3, v1, v2, v3;  
    option autocompile;  
    S := 0;  
    r1 := 2*n;  
    r2 := 2*n;
```

```

r3 := 2*n;
for v1 from -r1 to r1 do
  if abs(-v1) <= n then
    for v2 from -r2 to r2 do
      if abs(-v2) <= n and abs(v2-v1) <= n then
        for v3 from -r3 to r3 do
          if abs(-v3) <= n and abs(-v3+v1) <= n
            and abs(-v3+v2) <= n then
            S := S+1;
          end if
        end do
      end do
    end if
  end do
end do;
return S;
end proc:

```

C'est ce $\text{volume}_g(n)$ qui est utilisé par $\text{ehrhart}(g)$ pour obtenir le polynôme

$$4n^3 + 6n^2 + 4n + 1 \tag{B.1}$$

B.2 Polynôme d'Ehrhart dans le cas de Ree-Hoover

```

with(codegen):
with(GraphTheory):
with(CurveFitting):
with(combinat):

```

```
with(ListTools):
with(StringTools):
with(SpecialGraphs):
```

Comme pour le polynôme d'Ehrhart correspondant au poids de Mayer, on commence par construire la fonction $\text{volume}_g(n)$ pour calculer le nombre de points à coordonnées entières contenus dans les dilatés du graphe g donné en paramètre.

```
make := proc(garg)
  local procbody, locals, mainseq, i;
  procbody := Name(nam..integer);
  procbody := procbody, Parameters(n..integer, resultat);
  procbody := procbody, Options(autocompile);
  procbody := procbody, Description();
  locals := seq(v||i..integer, i=1..nops(Vertices(garg))-1);
  locals := locals, S..integer;
  locals := locals, seq(r||i..integer, i=
  1..nops(Vertices(garg))-1);
  procbody := procbody, Locals(locals);
  procbody := procbody, Globals();

  mainseq := Assign(S, 0);
  for i from 1 to (nops(Vertices(garg))-1) do
    mainseq := mainseq, Assign(r||i,
    nops(ShortestPath(garg, x0, x||i)) * n);
  od;
  mainseq := mainseq, makefor(garg, 1);
  mainseq := mainseq, Return(S);
```

```

    procbody := procbody, StatSeq(mainseq);
    return Proc(procbody);
end proc:

```

C'est dans *makefor* que se situe la différence avec le programme précédent. On traite différemment les arêtes qui ne sont pas dans le graphe. Cette procédure construit récursivement la boucle principale de la fonction $volume_g(n)$.

```

sp := (g, niveau) -> nops(ShortestPath(g, x0, x||niveau)) - 1;
makefor := proc(garg, niveau)
    local forbody, conditions, i, operation;
    forbody := v||niveau, -sp(garg, niveau)*n, 1, sp(garg, niveau)*n,
    true;
    conditions := true;
    for i from 0 to niveau - 1 do
        if member(x||i, convert(Neighbors(garg, x||niveau), set)) then
            conditions := conditions and abs(v||niveau - v||i) <= n;
        else
            conditions := conditions and abs(v||niveau - v||i) > n;
        fi;
    od;
    conditions := subs(v0=0, conditions);
    if niveau >= NumberOfVertices(garg) - 1
        then operation := If(resultat[1] = 2^31 - 1,
            StatSeq(Assign(resultat[2], resultat[2] + 1),
                Assign(resultat[1], 0)),
            StatSeq(Assign(resultat[1], resultat[1] + 1)));
        else operation := makefor(garg, niveau+1);
    fi;
end proc:

```

```

fi:
  forbody := forbody, StatSeq(If(conditions, StatSeq(operation)));
  For(forbody);
end proc:

```

Cette procédure reçoit un graphe g en paramètre, renomme les sommets de façon appropriée et retourne la fonction $\text{volume}_g(n)$ associée.

```

graphToProc := proc(g)
  RelabelVertices(g, [seq(x||i, i=0..NumberOfVertices(g)-1)]);
  intrep2maple(make(%));
end proc:

```

Cette procédure calcule le polynôme d'Ehrhart dans le cas de Ree-Hoover à partir d'un graphe g donné.

```

ehrhartrh := proc(g)
  local p, valeurs, n, x, v1, resultat;
  p := graphToProc(g);
  valeurs := Array(0..NumberOfVertices(g)-1, datatype=integer);
  for n from 0 to NumberOfVertices(g)-1 do
    x := 0;
    resultat := Array(1..2, datatype=integer[4]);
    p(n, resultat);
    x := x + resultat[1] + resultat[2]*2^32;
    valeurs[n] := x;
  od;
  convert(eval(valeurs), list);

```

```

    PolynomialInterpolation([seq(i, i=0..nops(%)-1)], %, z);
end proc:

```

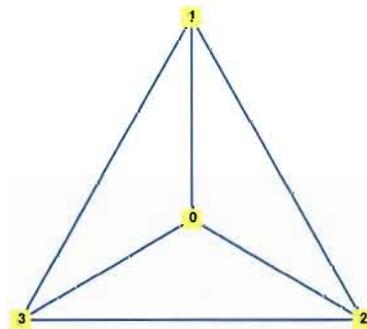
B.2.1 Exemple d'utilisation

Soit g le graphe complet à 4 sommets.

```

g := RelabelVertices(CompleteGraph(4), [seq(i, i=0..3)]);
DrawGraph(g);

```



Dans ce cas, le programme $volume_g(n)$ généré par $graphToProc(g)$ est :

```

proc (n::integer, resultat)
    local S, r1, r2, r3, v1, v2, v3;
    option autocompile;
    S := 0;
    r1 := 2*n;
    r2 := 2*n;
    r3 := 2*n;
    for v1 from -n to n do

```

```

if abs(-v1) <= n then
  for v2 from -n to n do
    if abs(-v2) <= n and
      abs(-v2+v1) <= n then
      for v3 from -n to n do
        if abs(-v3) <= n and abs(-v3+v1) <= n
          and abs(-v3+v2) <= n then
          if resultat[1] = 2147483647 then
            resultat[2] := resultat[2]+1;
            resultat[1] := 0
          else
            resultat[1] := resultat[1]+1
          end if
        end if
      end do
    end if
  end do
end if
return S
end proc

```

Finalement on obtient le polynôme d'Ehrhart RH suivant :

$$4z^3 + 6z^2 + 4z + 1$$

(B.2)

B.3 Méthode de Monte-Carlo

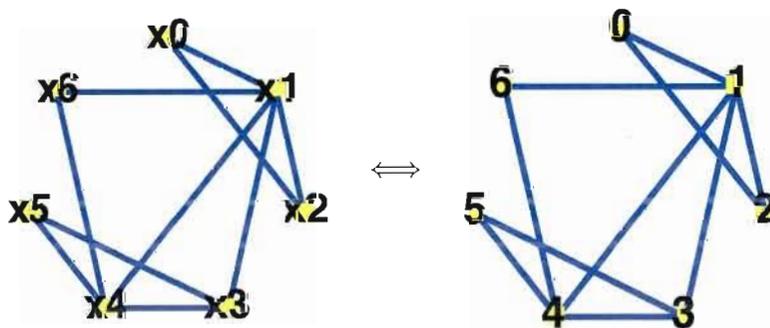
Cette procédure effectue le calcul approximatif du volume à l'aide de techniques statistiques.

```
with(GraphTheory):
with(combinat):
with(RandomGraphs):
with(RandomTools):
```

Tout d'abord voici une routine de ré-étiquetage de graphes.

```
toNum := proc (gx) :
  return RelabelVertices (gx, [seq(i, i=0..nops (Vertices (gx)) - 1)]);
end proc:
```

```
toX := proc (gn)
  return RelabelVertices (gn, [seq(x||i,
  i=0..nops (Vertices (gn)) - 1)]);
end proc:
```



Voici quelques routines de manipulation d'arbres.

```
parcoursProfondeur := proc(sommet, arbre, trace)
  voisins := convert(Neighbors(arbre, sommet), set);
  dejavisites := convert(trace, set);

  r := [op(trace), sommet];

  avisiter := voisins minus dejavisites;

  if avisiter = {} then
    return r;
  fi;

  for v in avisiter do
    r := parcoursProfondeur(v, arbre, r);
  od;

end proc:

etiquetageCroissant := proc(arbre)
  p := parcoursProfondeur(x0, arbre, []);
end proc:

arborescenceCroissante := proc(g)
  local t, reetiquetage, substitutions, gr;
  t := SpanningTree(g);

  reetiquetage := etiquetageCroissant(t);
```

```

substitutions := [];
for i from 1 to nops(Vertices(t)) do
  substitutions := [op(substitutions), reetiquetage[i]
    = x||(i-1)];
od;

t := Graph(subs(substitutions, Edges(t)));
gr := Graph(subs(substitutions, Edges(g)));

return gr, t;
end proc:

arbreToListe := proc(arbre, racine)
  liste := select(s -> s <> racine, Vertices(arbre));
  liste := sort(liste, (x,y) -> convert(x, string) <
    convert(y, string));
  map(s -> ShortestPath(arbre, s, racine)[2], liste);
end proc:

```

Voici des routines pour le calcul du volume

```

path_sum := proc(ij, ac)
  local i, j, p, s1, s2, s3, t1, t2;
  i := ij[1];
  j := ij[2];
  fac(0) := 0:
  k := nops(ac);

```

```

for p from 1 to k do
  fac(p) := ac[p]
od:
eval(fac):

s1 := {seq((fac@@m)(i), m=0..k)};
s2 := {seq((fac@@m)(j), m=0..k)};
s3 := s1 intersect s2;
t1 := s1 minus s3;
t2 := s2 minus s3;
t1 := map(i->u[i],t1);
t2 := map(i->u[i],t2);

r := convert(t2, '+')-convert(t1, '+');

return r;
end:

abs2 := proc(couple)
  if nops(couple) = 1
    then return abs(couple);
    else convert(map(a -> a^2, couple), '+');
  fi;
end proc;

ineq2 := proc(ij, ac, d)
  if d = 1
    then return abs(path_sum(ij,ac)) <= 1;

```

```

        else return abs2(path_sum(ij, ac)) <= 1;
    fi;
end proc;

```

```

caract2 := proc(compl, complz, ac, t, d)

```

```

    local rep, S1, S2, ij;

```

```

    global u;

```

```

    u := t;

```

```

    rep := 1; S1 := 1; S2 := 1;

```

```

    for ij in compl do

```

```

        if not(ineq2(ij,ac, d))

```

```

            then return 0;

```

```

        fi;

```

```

    od;

```

```

        for ij in complz do

```

```

if ineq2(ij,ac, d)

```

```

            then return 0;

```

```

        fi;

```

```

    od;

```

```

    return 1;

```

```

end:

```

Voici la routine qui calcule un point aléatoire dans la boule unité à d dimensions.

```

tir := evalf((2/1000000)*rand(1..1000000)-1);

```

200

```
tir2 := proc(d) local c1, c2;
  if d = 1
    then return tir();
  fi;

  c := [2$d]; # peu importe la valeur, pourvu que ca soit pas bon
  while convert(map(a -> a^2, c), '+' ) > 1 do
    for i from 1 to d do
      c[i] := tir();
    od;
  od;
  return c;

end;
```

Voici la routine principale de calcul du volume d'un graphe g où *compl* est la liste des arêtes qui ne figurent pas dans l'arborescence couvrante, *complz* est la liste des arêtes du complémentaire de g , et *ac* est l'arborescence couvrante croissante enracinée au sommet 0 représentée sous forme de liste.

```
numVol2 := proc(compl, complz, ac, Nmax, d) local t, i, S ;
  S := 0;
  k := nops(ac);
  for i from 1 to Nmax
    do t := [seq(tir2(d), j=1..k)] ;
    S := S + caract2(compl, complz, ac, t, d)
  od;
```

```

RETURN(evalf(2^k*S/Nmax));
end:

```

Cette procédure prépare les paramètres tels qu'attendus par *numVol2()* à partir d'un graphe *g*.

```

prepareParametres := proc(g)
  gcroissant, accroissant := arborescenceCroissante(g);
  ac := arbreToListe(accroissant, x0);
  compl := Edges(gcroissant) minus Edges(accroissant);

  graphecomplementaire := GraphComplement(gcroissant);
  complz := Edges(graphecomplementaire);

  s := seq(x||i=i, i=0..nops(Vertices(g)));
  complz := subs(s, complz);
  compl := subs(s, compl);
  ac := subs(s, ac);

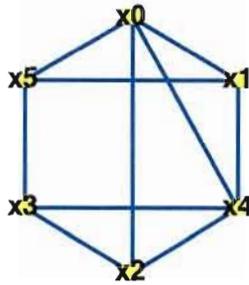
  compl := map(a -> sort(convert(a, list)), compl);
  complz := map(a -> sort(convert(a, list)), complz);

  return compl, complz, ac;
end proc:

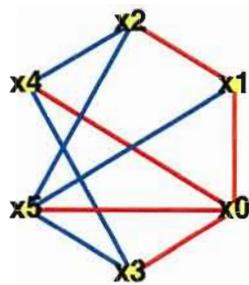
```

B.3.1 Exemple de manipulation des arbres

On commence avec un graphe 2-connexe aléatoire :



On en extrait une arborescence croissante.



Cette arborescence enracinée en 0 est représentée par la liste $[0, 1, 0, 0, 0]$.

B.3.2 Exemple de calcul de volume

Approximation du volume de K_4 en dimension 2 en utilisant 100000 points :

```
g := toX(CompleteGraph(4));
numVol2(prepareParametres(g), 100000, 2);
```

On a obtenu cette fois-ci 2.1944. On peut aussi faire la calcul en 1 dimension :

```
numVol2(prepareParametres(g), 100000, 1);
```

qui nous donne 3.9852 ce qui est encourageant, sachant que la valeur exacte est 4. Pour obtenir une réponse plus proche il faudrait utiliser plus de points.

B.4 Calcul du star content

```
with(GraphTheory) :
with(SpecialGraphs) :
with(combinat) :
```

Cette procédure réduit un graphe à un cas plus simple de même valeur mais comportant moins de sommets.

```
ReduitGraphe := proc(g)

    aretesTilda := Graph(Edges(GraphComplement(g)));
    aretesTilda := RelabelVertices(aretesTilda,
    [seq(i, i=1..NumberOfVertices(aretesTilda))]);

    # Si tous les sommets de g sont tilda, alors on ne peut
    plus reduire
    if NumberOfVertices(aretesTilda) = NumberOfVertices(g) then
        return g;
    fi;

    reduit := CompleteGraph(NumberOfVertices(g)-1);
    for e in Edges(aretesTilda) do
        DeleteEdge(reduit, e);
    od;
    reduit := Graph(Edges(reduit));
```

```

# si le graphe reduit n'est plus 2-connexe, alors on ne
  peut pas rduire
if not IsBiconnected(reduit) then
  return g;
fi;

# Si le graphe ne comporte que 4 sommets, on arrete la reduction
if NumberOfVertices(g) = 4 then
  return g;
fi;

reduit := ReduitGraphe(reduit);
reduit := Graph(Edges(reduit));
RelabelVertices(reduit, [seq(i, i=1..NumberOfVertices(reduit))]);
end proc:

```

Cette procédure détermine si un sous-graphe décrit par ses arêtes s remplit les conditions nécessaires pour contribuer au star content du graphe original.

```

sousGrapheValide := proc(s, nv)
  local g;
  if s = {} then return false; fi;
  if nops('union'(op(s))) <> nv then
    return false;
  fi;

```

```

g := Graph(s);
if IsBiconnected(g) then
  return true;
else
  return false;
fi;
end proc:

```

Cette procédure calcule le star content d'un graphe donné en paramètre.

```

StarContent := proc(garg)
  local nv, sousGraphes, valides, x, v, t, g, n, m, nz, mz;
  g := ReduitGraphe(garg);
  nv := NumberOfVertices(g);

  sousGraphes := choose(Edges(g)):

  x := 0;
  for v in sousGraphes do
    if sousGrapheValide(v, nv) then
      x := x + (-1)^(nops(g) - nops(v));
    fi;
  od;
  gc();

  # x est le coefficient du graphe reduit
  nz := NumberOfVertices(garg);
  mz := NumberOfVertices(g);

```

```

return (-1)^(binomial(nz,2) - binomial(mz,2)) *
x * (nz-2)! / (mz-2)!;
end proc:

```

B.4.1 Exemple de calcul du star content

```
StarContent(CompleteGraph(7));
```

Ce qui donne 120.

B.5 Recherche montrant que les deux poids ne sont pas fonctions de certains paramètres

B.5.1 Procédure Maple pour certains paramètres

```

with(GraphTheory):
with(combinat):
with(ListTools):

```

Ce fichier contient la matrice *GraphesRH_Numerotes* qui contient l'ensemble des calculs effectués dans le cadre de ce projet. Puisque nous avons faits les calculs pour tous les graphes 2-connexes jusqu'à 8 sommets, ce tableau comporte 7662 entrées. On a (dans l'ordre) :

1. Une étiquette, par exemple "2.0.1" correspondant a l'étiquetage du tableau présenté en annexe.
2. Le nombre de sommets.
3. La cardinalité du groupe d'automorphismes.
4. La liste des arêtes du graphe.
5. Le polynôme d'Ehrhart.

6. Le star content.

7. Le polynôme d'Ehrhart Ree-Hover.

```
read "GraphesRH_Numerotes.txt";
```

On définit ensuite un ensemble de méthodes pour calculer certaines valeurs des graphes. On accède au graphe selon son indice dans le tableau *GraphesRH_Numerotes*.

```
NombreSommets := proc(n)
  option remember;
  GraphesRH_Numerotes[n,2];
end proc;
```

```
NombreAretes := proc(n)
  option remember;
  nops(GraphesRH_Numerotes[n,4]);
end proc;
```

```
Graphe := proc(n)
  option remember;
  Graph(GraphesRH_Numerotes[n,4]);
end proc;
```

```
Degres := proc(n)
  option remember;
  DegreeSequence(Graphe(n));
end proc;
```

```
VolumeMayer := proc(n)
  option remember;
  lcoeff(GraphesRH_Numerotes[n,5]);
end proc:

PoidsMayer := proc(n)
  option remember;
  VolumeMayer(n) * (-1)^NombreAretes(n);
end proc:

VolumeRH := proc(n)
  option remember;
  lcoeff(GraphesRH_Numerotes[n,7]);
end proc:

PoidsRH := proc(n)
  option remember;
  VolumeRH(n) * (-1)^NombreAretes(n);
end proc:

NombreArbresCouvrants := proc(n)
  option remember;
  NumberOfSpanningTrees(Graphe(n));
end proc:

Automorphismes := proc(n)
  option remember;
```

```

    GraphesRH_Numerotes [n, 3];
end proc:

```

```

StarContent := proc(n)
    option remember;
    GraphesRH_Numerotes [n, 6]
end proc:

```

```

NombreEtiquetages := proc(n)
    option remember;
    NombreSommets(n)! / Automorphismes(n);
end proc:

```

```

Numero := proc(n)
    GraphesRH_Numerotes [n, 1];
end proc:

```

On place ces méthodes dans une liste qu'on utilisera plus tard pour les manipuler.

```

Criteres := [NombreSommets, NombreAretes, Degres, VolumeMayer,
    PoidsMayer, VolumeRH, PoidsRH, NombreArbresCouvrants,
    Automorphismes, StarContent, NombreEtiquetages];

```

Cette procédure teste si deux graphes de mêmes paramètres ont des valeurs différentes. Si c'est le cas, on a un contre-exemple qui montre que *Valeur()* n'est pas fonction des *Parametres*.

```

PaireGrapheEstContreExemple := proc(Paire, Parametres, Valeur)
    local c1, c2;

```

```

p := convert(Paire, set);
if (Valeur(Paire[1]) <> Valeur(Paire[2])) then

    c1 := map(f -> f(p[1]), Parametres);
    c2 := map(f -> f(p[2]), Parametres);

    if (c1 = c2) then
        # On a deux valeur mais les memes parametres, c'est
        un contre-exemple
        return true;
    fi;
fi;

# Le test n'est pas concluant
return false;
end proc:

```

Recherche exhaustive de contre-exemples pour une valeur et des paramètres donnés

Parametres Liste de critères à utiliser comme paramètres

Valeur Valeur dont on vérifie la dépendance aux paramètres

NombreDeGraphesATester Quels graphes utiliser dans le tableau *GraphesRH_Numerotes*

```

TesteCandidat := proc(Parametres, Valeur, NombreDeGraphesATester)
    local ValeurDesParametres, g, GraphesDeMemeParametres,
    ContreExemples, paquet, minimum, PaquetContreExemple, pm, ub, i;
    ValeurDesParametres := [seq([i, map((f,i) -> f(i),
    Parametres, i)], i=1..NombreDeGraphesATester)]:

```

```

ValeurDesParametres := Categorize((x,y) -> x[2] = y[2],
ValeurDesParametres):

GraphesDeMemeParametres := []:
for g in ValeurDesParametres do
  GraphesDeMemeParametres := [map(x -> x[1], g),
  op(GraphesDeMemeParametres)];
od:
GraphesDeMemeParametres := remove(x -> nops(x) = 1,
GraphesDeMemeParametres);

ContreExemples := []:
for paquet in GraphesDeMemeParametres do
  map(x -> Valeur(x), paquet);
  if (nops( convert(%, set) ) > 1 ) then
    ContreExemples := [paquet, op(ContreExemples)];
  fi;
od:

if (nops(ContreExemples) > 0) then
  minimum := sort(ListTools[Flatten](ContreExemples))[1];
  PaquetContreExemple := op(select(li -> minimum in li,
  ContreExemples));

  pm := PoidsMayer(PaquetContreExemple[1]):

```

```

ub := nops(PaquetContreExemple):
for i from 2 to ub do
  if Valeur(PaquetContreExemple[i]) <> pm then
    return {PaquetContreExemple[1], PaquetContreExemple[i]};
  fi;
od;
else
  return {};
fi;

end proc:

```

Cette procédure engendre des combinaisons de paramètres et recherche des contre-exemples.

Valeur Nom du critère à tester.

```

RechercheExhaustive := proc(Valeur)
  local parametresPossibles, candidats, candidat,
  contreExemples, autres;

  contreExemples := {};
  parametresPossibles := remove(x -> x = Valeur, Criteres);
  candidats := remove(x -> x = [], choose(parametresPossibles));
  candidats := sort(candidats, length);

  while (candidats <> []) do
    candidat := candidats[1];
    candidats := candidats[2..nops(candidats)];
  end while;
end proc;

```

```

# Recherche d'abord dans les graphes ayant moins de sommets,
  et passe
# aux graphes a plus de sommets seulement si aucun
contre-exemple n'a ete trouve.
for profondeur in [15, 71, 359, 7662] do
  #printf(" Maintenant en profondeur %d\n", profondeur);
  paire := TesteCandidat(candidat, Valeur, profondeur);
  if (paire <> {}) then break; fi;
od;
if (paire <> {}) then
  contreExemples := contreExemples union {[candidat, paire]};

  # on teste cette nouvelle paire avec tous les candidats
  restants
  # (un contre-exemple pour certains parametres est tres
  souvent un
  # contre-exemples pour d'autres)
  autres := select(x -> PaireGrapheEstContreExemple(paire, x,
    uneval(Valeur)),
    candidats);
  for ce in autres do
    contreExemples := contreExemples union {[ce, paire]};
  od;
  candidats := remove(x -> PaireGrapheEstContreExemple(paire,
    x, uneval(Valeur)), candidats);
else

```

```

    # Pas de contre-exemple pour ces parametres, inutile
    d'en rajouter
    candidats := remove(x -> {op(candidat)} subset {op(x)},
    candidats);
    printf(" Possiblent fonction de %a.\n", candidat);
  fi;
od:

  return contreExemples;
end proc:

```

Parmis tous les contre-exemples trouvés, la première des procédures suivantes conserve uniquement les ensembles maximaux de paramètres et la deuxième les affiche.

contreExemples Ensemble ou liste de contre-exemple (un contre-exemple est une liste dont le premier élément est une liste de paramètres, et dont le deuxième élément est une paire de graphes qui illustre le contre-exemple).

```

NettoyerContreExemples := proc(contreExemples)
  local Nettoyee, item, aEnlever;
  Nettoyee := contreExemples;
  for item in contreExemples do
    aEnlever := choose(item[1]);
    # On conserve le plus gros
    aEnlever := aEnlever[1..nops(aEnlever)-1];

    Nettoyee := remove(x -> x[1] in aEnlever, Nettoyee);
  od;
  return Nettoyee;

```

```

end proc:

AfficherContreExemples := proc(Valeur, contreExemples)
  local ce;
  for ce in contreExemples do
    printf("%a par les graphes %s et %s ", ce[1],
      Numero(ce[2][1]), Numero(ce[2][2]));
    printf("(%a, %a, %a)\n", Valeur(ce[2][1]), Valeur(ce[2][2]),
      map(f -> f(ce[2][1]), ce[1]));
  od;
end proc:

```

B.5.2 Exemples

```

RechercheExhaustive(PoidsRH):
NettoyerContreExemples(%):
AfficherContreExemples(PoidsRH, %);

```

Possiblent fonction de [Degres, VolumeRH].

Possiblent fonction de [Degres, PoidsMayer].

Possiblent fonction de [Degres, VolumeMayer].

Possiblent fonction de [PoidsMayer, VolumeRH].

Possiblent fonction de [VolumeMayer, VolumeRH].

Possiblent fonction de [NombreAretes, VolumeRH].

Possiblent fonction de [Degres, NombreArbresCouvrants].

Possiblent fonction de [VolumeRH, NombreArbresCouvrants].

[NombreSommets, NombreAretes, VolumeMayer, PoidsMayer, NombreArbresCouvrants, Automorphismes, StarContent, NombreEtiquetages] par les graphes 6.5.7 et 6.6.10 (0, -1/30, [6, 9,

169/15, -169/15, 55, 2, 0, 360))

[NombreSommets, NombreAretes, Degres, Automorphismes, StarContent, NombreEtiquetages]
par les graphes 7.7.109 et 7.7.151 (-1/360, 0, [7, 13, [4, 2, 2, 4, 4, 5, 5], 2, 0, 2520])

[NombreSommets, VolumeRH, Automorphismes, StarContent, NombreEtiquetages] par les graphes
6.3.1 et 6.4.1 (-1/5, 1/5, [6, 1/5, 12, 0, 60])

RechercheExhaustive(PoidsMayer) :

NettoyerContreExemples(%) :

AfficherContreExemples(PoidsMayer, %);

Possiblent fonction de [Degres, VolumeMayer].

Possiblent fonction de [NombreAretes, VolumeMayer].

Possiblent fonction de [VolumeMayer, NombreArbresCouvants].

[NombreSommets, NombreAretes, Degres, VolumeRH, PoidsRH, NombreArbresCouvants, Au-
tomorphismes, StarContent, NombreEtiquetages] par les graphes 8.8.77 et 8.8.142 (-3856/315, -
1103/90, [8, 19, [5, 4, 5, 4, 5, 4, 5, 6], 0, 0, 12852, 2, inconnu, 20160])

[NombreSommets, VolumeMayer, VolumeRH, PoidsRH, Automorphismes, StarContent, NombreE-
tiquetages] par les graphes 7.5.16 et 7.6.32 (2251/180, -2251/180, [7, 2251/180, 0, 0, 4, 0, 1260])

B.6 Implémentation en Maple de la méthode de Fourier

Nous présentons ici des procédures en Maple qui implémentent la méthode de Fourier pour le calcul du poids de Mayer. La procédure principale `wMayer` prend en entrée les deux paramètres α

et ca où a est une arborescence couvrante d'un graphe connexe c donnée sous la forme d'une liste

$$a = [\alpha(1), \alpha(2), \dots, \alpha(k)], \quad \alpha(i) < i, \quad (\text{B.3})$$

et son complémentaire ca donné par

$$ca = c \setminus a = [\{i, j\} | \{i, j\} \text{ arête de } c \text{ non présente dans } a] = ca \text{ (notation)}. \quad (\text{B.4})$$

B.6.1 Calcul de la différence divisée pour des points distincts

Dans le programme qui suit, la procédure *dd* calcule la différence divisée de *expr* pour la liste de points distincts *lst* par rapport à la variable *var*.

```
dd := proc(expr, lst, var) local i, p, n;
  n := nops(lst);
  for i from 1 to n
  do
    p[i] := mul(lst[i]-lst[j], j = 1..i-1)*mul(lst[i]-lst[j], j = i+1..n)
  od;
  add(subs(var=lst[i], expr)/p[i], i=1..n);
end;
```

B.6.2 Calcul de la différence divisée pour des points répétés

Dans le programme qui suit, la procédure *DD* calcule la différence divisée de *expr* pour le multi-ensemble *mset* par rapport à la variable *var* dans le cas confluent.

```
DD := proc(expr, mset, var) local i, p, lstv, v, lstm, n, aux;
  n := nops(mset);
  lstv := [seq(op([i, 1], mset), i=1..n)];
  lstm := [seq(op([i, 2], mset), i=1..n)];
```

```

aux := dd(expr, lstv, var);
for i from 1 to n do
if lstm[i]>1 then
aux := diff(aux, lstv[i]$(lstm[i]-1))/(lstm[i]-1)! fi; od;
RETURN(aux);
end:

```

B.6.3 Réduction d'un terme en un autre qui utilise seulement $\exp(i\nu t)$ où $\nu \geq 0$

Dans le programme qui suit, la procédure *clean* implémente la remarque 11 sur l'accélération. Elle prend `the_term := $c_\nu(t)e^{i\nu t}$` dans `T` et le transforme en $2c_\nu(t)e^{i\nu t}$, si $\nu > 0$, en $c_0(t)e^{i0t}$, si $\nu = 0$ ou en 0, si $\nu < 0$ (`var:=t`).

```

clean := proc(the_term, var);
if limit(subs(var=I*var, the_term), var=infinity) = 0 then
RETURN(2*the_term)
elif limit(subs(var=-I*var, the_term), var=infinity) = 0 then
RETURN(0)
else RETURN(the_term) fi;
end:

```

B.6.4 Réduction de l'intégrand en utilisant seulement $\exp(i\nu t)$ où $\nu \geq 0$

Dans le programme qui suit, la procédure *U_of_T* utilise la fonction *clean* en transformant `T` en `U` où (`var:=t`).

```

U_of_T := proc(z, var) local aux;
aux := combine(expand(convert(z, exp)));
RETURN( map(clean, aux, var) )
end:

```

B.6.5 Calcul de l'intégrale de T/P (lemme 8)

Dans le programme qui suit, la procédure *compute* implémente le lemme 8 en intégrant TP ($:=T/P$) par rapport à la variable ($\text{var}:=t$).

```

compute := proc(TP,var) local sol, T, U_T, P, lc, tau, sol_tau,z;
T := numer(TP); P := denom(TP);
T := combine(T,trig); U_T := U_of_T(T,var);
lc := lcoeff(P,var);
sol := convert([solve(P,var)], multiset);
sol_tau := [seq([tau[i-1],sol[i][2]], i=1..nops(sol))];
z := DD(U_T,sol_tau,var);
z := subs([seq(tau[i-1]=sol[i][1], i=1..nops(sol))],z);
RETURN(combine((I/2)*normal(z/lc), trig));
end:

```

B.6.6 Calcul de l'ensemble des descendants d'un sommet j dans l'arborescence a

Dans le programme qui suit, la procédure *desc* calcule l'ensemble des descendants du sommet j dans l'arborescence a .

```

desc := proc(j, a) local aux, ind;
aux := {j}; ind := j;
while ind <> 0
do aux := aux union {a[ind]};
ind := a[ind]
od; RETURN(aux)
end:

```

B.6.7 Calcul de l'ensemble des sommets de la sous-arborescence induite a_ν

Dans le programme qui suit, la procédure *vert* calcule l'ensemble des sommets de la sous-arborescence a_ν en prenant en entrée a et ν .

```

vert := proc(a, nu) local aux, j;
aux := {};
for j from 0 to nops(a)
do
  if evalb(nu in desc(j, a)) then aux := aux union {j} fi;
od;
RETURN(aux);
end:

```

B.6.8 Calcul de la différence entre les variables entrantes et sortantes

Dans le programme qui suit, la procédure *sum_diff* calcule $\sum_{a_\nu \prec e} t_e - \sum_{e \prec a_\nu} t_e$ en prenant en entrée l'arborescence a , son complément ca et le sommet ν .

```

sum_diff := proc(a, ca, nu) local e, aux;
aux := 0;
for e in ca
do
  if evalb( min(op(e)) in vert(a, nu) ) then aux := aux+t[e] fi;
  if evalb( max(op(e)) in vert(a, nu) ) then aux := aux-t[e] fi;
od;
RETURN(aux);
end:

```

B.6.9 La transformée de Fourier de $\chi(x \in [-1, 1])$

Dans le programme qui suit, la procédure *s* est la fonction

$$x \rightarrow \begin{cases} \frac{2 \sin x}{x} & x \neq 0, \\ 2 & x = 0, \end{cases}$$

qui est la transformée de Fourier de $\chi(|x| \leq 1)$.

```
s := x -> if x=0 then 2 else 2*sin(x)/x fi:
```

B.6.10 Calcul de l'intégrand pour le poids de Mayer de *c*

Dans le programme qui suit, la procédure *theTP* calcule l'intégrand dans (6.56) qui donne le poids de Mayer $w_M(c)$ où *c* est donné en entrées sous la forme (a, ca) .

```
theTP := proc(a,ca) local p, nu;
p := mul(s(t[e]), e in ca);
for nu from 1 to nops(a) do p := p*s(sum_diff(a,ca,nu)) od;
RETURN(p);
end:
```

B.6.11 Représentation des *sum_diff* comme des multi-ensembles

Dans le programme qui suit, la procédure *the_items* représente la famille des “*sum_diff*” comme multi-ensemble en prenant en entrée l'arborescence *a* et son complément *ca*.

```
the_items := proc(a,ca) local e, nu,item; global t;
item := NULL;
for e in ca do item := item,abs(t[e]) od;
for nu from 1 to nops(a)
```

```

do
item := item, abs(sum_diff(a,ca,nu))
od;
item := convert([item], multiset);
RETURN(convert(item, set));
end:

```

B.6.12 Calcul du poids de Mayer

Dans le programme qui suit, la procédure principale *wMayer* utilise toutes les procédures précédentes et calcule le poids de Mayer d'un graphe c en prenant en entrée l'arborescence a et son complément ca .

```

wMayer := proc(a,ca) local A, items,e, it; global t;
items := the_items(a,ca); A := 1;
for e in ca
do
for it in items
do if has(it,t[e]) then
A := A*s(op(op(1,it)))^op(2,it); items := items minus {it} fi;
od;
A := compute(A, t[e]);
od;
RETURN(simplify(A));
end:

```

B.6.13 Calcul du poids de Mayer des échelles

Le programme qui suit illustre l'utilisation de la procédure *wMayer* en calculant le poids des échelles $\text{Échelle}[k]$, pour $k = 2, 3, \dots, 20$. C'est ainsi que la table 4 a été produite.

```
for k from 2 to 20 do
a := [seq(2*floor((i-1)/2), i=1..2*k), 2*k]:
ca := [seq({2*i-1, 2*i+1}, i=1..k)]:
w_ladder[k] := wMayer(a, ca):
tt := time():
print(k, evalf(w_ladder[k]), w_ladder[k]);
time()-tt;
od;
```

RÉFÉRENCES

- Abramowitz, M. et I. Stegun. 1974. *Handbook of Mathematical Functions, With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications, Incorporated.
- Bergeron, F., G. Labelle, et P. Leroux. 1998. *Combinatorial species and tree-like structures*. T. 67, série *Encyclopedia of Mathematics and its Applications*. Cambridge : Cambridge University Press. Translated from the 1994 French original by Margaret Readdy, With a foreword by Gian-Carlo Rota.
- Bernardi, O. 2008. « Solution to a combinatorial puzzle arising from mayer's theory of cluster integrals », *Sém. Lothar. Combin.*, vol. 59, p. Art. B59e, 10.
- Borchardt, C. W. 1860. « Ueber eine der interpolation entsprechende darstellung der eliminations-resultante », *Journal fr die reine und angewandte Mathematik*, vol. 57, p. 111–121.
- Brydges, D. C. et J. Z. Imbrie. 2003. « Dimensional reduction formulas for branched polymer correlation functions », *J. Statist. Phys.*, vol. 110, no. 3-6, p. 503–518. Special issue in honor of Michael E. Fisher's 70th birthday (Piscataway, NJ, 2001).
- Chaiken, S. et D. J. Kleitman. 1978. « Matrix tree theorems », *J. Combinatorial Theory Ser. A*, vol. 24, no. 3, p. 377–381.
- Champeney, D. C. 1987. *A handbook of Fourier theorems*. Cambridge : Cambridge University Press.
- Clisby, N. 2004. « Negative virial coefficients for hard spheres », *PhD thesis*, p. Stony Brook University, Stony Brook, New York.
- Clisby, N. et B. M. McCoy. 2004. « Negative virial coefficients and the dominance of loose packed diagrams for D -dimensional hard spheres », *J. Statist. Phys.*, vol. 114, no. 5-6, p. 1361–1392.
- Clisby, N. et B. M. McCoy. 2006. « Ninth and tenth order virial coefficients for hard spheres in D dimensions », *J. Stat. Phys.*, vol. 122, no. 1, p. 15–57.
- Corless, R. M., G. H. Gonnet, D. E. G. Hare, D. J. Jeffrey, et D. E. Knuth. 1996. « On the Lambert W function », *Adv. Comput. Math.*, vol. 5, no. 4, p. 329–359.
- Ducharme, M. G. 2004. « Intgrales de mayer et graphes 2-connexes pondrs », *M.Sc. Thesis, UQÀM, Montréal*, p. 71.

- Hoover, W. G. et J. C. Poirier. 1962. « Comparaison of some exact and approximate results for gases of parallel hard lines, squares, and cubes », *J. Chem. Phys.*, vol. 38, p. 327–345.
- Kaouche, A. et G. Labelle. 2008. « Mayer polytopes and divided differences », *Congrès Combinatorial Identities and their applications in Statistical Mechanics*, p. Isaac Newton Institute de l'Université de Cambridge, en Angleterre [<http://www.newton.ac.uk/webseminars/pg+ws/2008/csm/csmw03/>].
- Kaouche, A. et P. Leroux. 2007a. « Table for the Mayer graph weight of 2-connected graphs of size 7 », p. [<http://www.lacim.uqam.ca/~kaouche/TableauMayer7.pdf>].
- — —. 2007b. « Table for the Mayer graph weight of 2-connected graphs of size 8 », p. [<http://www.lacim.uqam.ca/~kaouche/TableauMayer8.pdf>].
- — —. 2007c. « Tables for the Mayer and Ree-Hoover graph weights of 2-connected graphs of size 8 », p. [<http://www.lacim.uqam.ca/~kaouche/TableauRH8.pdf>].
- — —. 2008a. « Graph weights arising from Mayer and Ree-Hoover theories », *Proceedings of the 20th FPSAC conference*, p. To appear in a special issue of the journal Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science.
- — —. 2008b. « Invariants de graphes liés aux gaz imparfaits », *Conférence Internationale Sémin. Lothar. Combin.*, vol. 61, p. Portugal [<http://www.mat.univie.ac.at/~slc/wpapers/s61.html>].
- — —. 2008c. « Mayer and Ree-Hoover weights of infinite families of 2-connected graphs », *Sém. Lothar. Combin.*, vol. 61, p. (A paraître).
- Labelle, G., P. Leroux, et M. G. Ducharme. 2007. « Graph weights arising from Mayer's theory of cluster integrals », *Sém. Lothar. Combin.*, vol. 54, p. Art. B54m, 40.
- Labelle, J. 1981. *Théorie des graphes*. Modulo Éditeur.
- Lass, B. 2005. « Personal communication ».
- Leroux, P. 2004. « Enumerative problems inspired by Mayer's theory of cluster integrals », *Electron. J. Combin.*, vol. 11, no. 1, p. Research Paper 32, 28 pp. (electronic).
- Maplesoft. 2008. *Maple 12 user manual*. Maplesoft.
- Mayer, J. E. et M. G. Mayer. 1977. *Statistical mechanics*. John Wiley & Sons, New York-London-Sydney, second édition.
- Phillips, G. D. J. 2000. *Elementary lectures in statistical mechanics*. Coll. « Graduate Texts in Contemporary Physics ». New York : Springer-Verlag.
- Ree, F. H. et W. G. Hoover. 1964a. « Fifth and sixth virial coefficients for hard spheres and hard

- disks », *J. Chem. Phys.*, vol. 40, p. 939–950.
- ——. 1964b. « Reformulation of the virial series for classical fluids », *J. Chem. Phys.*, vol. 41, p. 1635–1645.
- ——. 1967. « Seventh virial coefficients for hard spheres and hard discs », *J. Chem. Phys.*, vol. 46, p. 4181–4196.
- Riddell, Jr., R. J. et G. E. Uhlenbeck. 1953. « On the theory of the virial development of the equation of state of mono-atomic gases », *J. Chem. Phys.*, vol. 21, p. 2056–2064.
- Ruelle, D. 1999. *Statistical mechanics*. River Edge, NJ : World Scientific Publishing Co. Inc. Rigorous results, Reprint of the 1989 edition.
- Stanley, R. P. 1997. *Enumerative combinatorics. Vol. I*. T. 49, série *Cambridge Studies in Advanced Mathematics*. Cambridge : Cambridge University Press. With a foreword by Gian-Carlo Rota, Corrected reprint of the 1986 original.
- Sylvester, J. J. 1857. « On the change of systems of independent variables », *Quarterly Journal of Mathematics*, vol. 1, p. 42–56.
- Thompson, C. J. 1972. *Mathematical statistical mechanics*. New York : The Macmillan Co. A Series of Books in Applied Mathematics.
- Uhlenbeck, G. E. et G. W. Ford. 1963. *Lectures in statistical mechanics*. T. 1960, série *With an appendix on quantum statistics of interacting particles by E. W. Montroll. Lectures in Applied Mathematics (Proceedings of the Summer Seminar, Boulder, Colorado)*. Providence, R.I. : American Mathematical Society.
- Zygmund, A. 2002. *Trigonometric series. Vol. I, II*. Coll. « Cambridge Mathematical Library ». Cambridge : Cambridge University Press, third édition. With a foreword by Robert A. Fefferman.